

**KOCAELİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

BİLİŞİM SİSTEMLERİ MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**NANOYAPI ÖRNEKLEME YAZILIMLARINDA ENİYİLEMİYİ
ARTTIRMA YOLLARI**

BAHADIR SALMANKURT

KOCAELİ 2019

KOCAELİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BİLİŞİM SİSTEMLERİ MÜHENDİSLİĞİ
ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

NANOYAPI ÖRNEKLEME YAZILIMLARINDA
ENİYİLEMİYİ ARTTIRMA YOLLARI

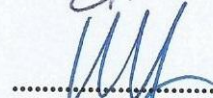
BAHADIR SALMANKURT

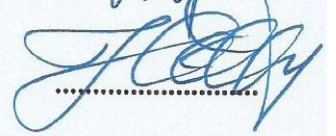
Doç. Dr. Hikmet Hakan GÜREL
Danışman, Kocaeli Üniversitesi

Doç. Dr. Halil YİĞİT
Jüri Üyesi, Kocaeli Üniversitesi

Prof. Dr. Hilmi ÜNLÜ
Jüri Üyesi, İstanbul Teknik Üniversitesi


.....


.....


.....

Tezin Savunulduğu Tarih: 14.02.2019

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR

Dünyada ve ülkemizde nanoyapı örnekleme yazılımları önemli hale gelmektedir. Özellikle deneysel verilere ihtiyaç duymadan laboratuvar ortamında elde edilen sonuçlara yakın değerler elde etmek mümkündür. Bu yazılımlardan daha çok verim alabilmek için işlemlerimizi daha az zamanda yapabilecek ve daha az maliyetli yöntemler geliştirmeye ihtiyaç duyulmaktadır. Bu tez çalışmasının ana motivasyon kaynağı bu alanda eksik gördüğümüz kısımlara vurgu yapmak ve bu konuda çalışan araştırmacılara yön verecek nitelikte bir örnek üzerinden verimliliği artıracak noktalara değinmek olacaktır.

Nanoyapı örnekleme yazılımlarını öğrenip uygulama konusunda bana desteğini hiç esirgemeyen ve her türlü destekte bulunan sayın danışman hocam Doç. Dr. Hikmet Hakan GÜREL'e teşekkür ederim. Ayrıca hayatım boyunca beni destekleyen anneme, babama ve kardeşime de sonsuz minnet duygularımı sunarım.

Şubat – 2019

Bahadır SALMANKURT

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	iii
TABLOLAR DİZİNİ	iv
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	v
ÖZET.....	vi
ABSTRACT	vii
GİRİŞ	1
1. GENEL BİLGİLER	3
1.1. Hesaplamalı Nanobilimde Temel Fizik İlkeleri	3
1.1.1. Çok parçacıklı sistemlere uygun hamiltonyen.....	6
1.1.2. Çok parçacıklı sistemlere uygun dalga fonksiyonu	8
1.1.3. Hartree yöntemi	8
1.1.4. HF (Hartree-Fock) yöntemi	10
1.1.5. Yoğunluk fonksiyonel teorisi.....	11
1.1.6. SCF (Öz-uyumlu alan) Yöntemi.....	13
1.1.7. PBC (Periyodik sınır şartı).....	13
1.1.8. Temel setler.....	14
1.1.8.1. Düzlem dalga yöntemi ile çözümler.....	14
1.1.8.2. Atom merkezli orbital yöntemi ile çözümler	16
1.1.9. PP (Yapay potansiyel)	17
1.2. Hesaplanan Malzemenin Literatürdeki Önemi.....	18
1.3. Bilgisayar Ortamında Çözümlemeler	20
1.3.1. Donanım ve işletim sistemi.....	21
1.3.2. Yazılımların derlenmesi.....	22
1.3.3. MPI (Mesaj Geçirmeli Arayüz)	25
1.3.4. Kütüphaneler.....	26
1.3.5. Verileri yorumlamak için parametreler.....	26
2. YÖNTEM.....	29
3. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	30
3.1. En İyi Fiziksel Parametrelerin Belirlenmesi	30
3.1.1. K noktalarının Etkisi	30
3.1.2. Kesilim Enerjisinin (E_{cut}) Etkisi.....	31
3.1.3. Boşluğun (Vacuum) etkisi	31
3.2. En İyi Derleme Parametrelerinin ve Çekirdek Sayılarının Belirlenmesi	33
3.3. Yazılımlarda Elde Edilen Fiziksel Veriler ve Yorumlanması.....	37
4. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	40
KAYNAKLAR	41
EKLER.....	47
KİŞİSEL YAYIN VE ESERLER	55
ÖZGEÇMİŞ	57

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1.	Dalga fonksiyonu ve durum vektörlerinin temsili gösterimi	4
Şekil 1.2.	Hartree yönteminde çok parçacıklı sistemin tasviri	9
Şekil 1.3.	HF yönteminde çok parçacıklı sistemin tasviri	10
Şekil 1.4.	(a) DFT ve (b) 3. derece denklem çözümü için scf algoritması.....	13
Şekil 1.5.	Periyodik sınır şartı	14
Şekil 1.6.	Gerçek uzay ile ters uzay arasındaki ilişki	15
Şekil 1.7.	Çekirdek, öz (kor) elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş bir atom	18
Şekil 1.8.	(a) Grafenin üstten ve yandan görünüşü, (b) Grafenin elektronik band yapısı. Mavi ile gösterilen Fermi seviyesidir.	19
Şekil 1.9.	Normal ve SIMD toplama işlemi.....	24
Şekil 3.1.	k noktalar sayısı. (a) Mavi Fosforen'in farklı birim hücrelere göre enerjideki değişim (b) Bu çalışma için Enerjinin k nokta sayılarına göre değişimi.	30
Şekil 3.2.	Quantum Espresso için kesilim Enerjisi.	31
Şekil 3.3.	Boşluğun etkisi.....	32
Şekil 3.4.	Hesaplama sürelerinin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması.....	33
Şekil 3.5.	Yazılımlardan elde edilen sonuçların Amdahl yasasından elde edilenlerle karşılaştırılması	34
Şekil 3.6.	Hızlanma değerlerinin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması.....	35
Şekil 3.7.	Paralel verimliliklerin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması	35
Şekil 3.8.	Siesta programı için hesaplama süresinin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması	36
Şekil 3.9.	Siesta ve QE yazılımları için paralel verimliliklerin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması.....	36
Şekil 3.10.	Siesta programı için hızlanma ve paralel verimliliklerin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması.....	36
Şekil 3.11.	Adenine molekülünün yapısı	38
Şekil 3.12.	Moleküllerin BP üzerindeki en uygun pozisyonlarının üstten ve yandan gösterimi.	39

TABLULAR DİZİNİ

Tablo 1.1.	Siesta ve QE için makefile içeriği.....	23
Tablo 3.1.	Adenine molekülünün bağ uzunluklarının karşılaştırılması (Å cinsinden).....	37
Tablo 3.2.	eV cinsinden etkileşim enerjileri. Parantez içindekiler QE ile elde edilmiştir.	38



SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Å	: Angstrom
E_{cut}	: Kesilim Enerjisi
eV	: Elektronvolt
H	: Hamiltonyen
Ry	: Rydberg

Kısaltmalar

AO	: Atomic Orbitals (Atomik Orbitaller)
BFGS	: Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno
BO	: Born-Oppenheimer
BP	: Black Phosphorene (Siyah Fosforen)
CG	: Conjugate Gradient
DFT	: Density Functional Theory (Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı)
DZP	: Double Zeta Polarization (Çift Zeta polarizasyonu)
GGA	: Generalized Gradient Approximation (Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı)
HF	: Hartree-Fock
HK	: Hohenberg-Kohn
IC	: Integrated Circuit (Tümleşik Devre)
IEEE	: The Institute of Electrical and Electronics Engineers (Elektrik ve Elektronik Mühendisleri Enstitüsü)
KS	: Kohn-Sham
LDA	: Local Density Approximation (Bölgesel Yoğunluk Yaklaşımı)
LCAO	: Linear Combinations of the Atomic Orbitals (Atomik Orbitallerin Doğrusal Kombinasyonu)
MPI	: Message Passing Interface (Mesaj Geçirmeli Arayüz)
MP	: Monkhorst–Pack
NAO	: Numerical Atomic Orbital (Nümerik Atomik Orbital)
PBC	: Periodic Boundry Condition (Periyodik Sınır Şartı)
PW	: PlaneWave (Düzlem Dalga)
QE	: Quantum Espresso
SCF	: Self-Consistent Field (Öz Uyumlu Alan)
SIMD	: Single Instruction, Multiple Data (Tek İşlem, Çoklu Veri)
SZ	: Single Zeta (Tek Zeta)
SZP	: Single Zeta Polarization (Tek Zeta Polarizasyonu)
vdW	: van der Waals

NANOYAPI ÖRNEKLEME YAZILIMLARINDA ENİYİLEMİYİ ARTTIRMA YOLLARI

ÖZET

DFT (Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı) ortaya çıktığından beri hesaplamalı nanobilim önemli hale gelmiştir. Bilgisayarlara dayalı sayısal hesaplamalar iki önemli konuya odaklanmıştır, bunlar hesaplama hassasiyeti ve hesaplama hızıdır. Bu çalışmada, açık kaynak kodlu PW (Düzlem dalga) tabanlı QE (Quantum Espresso) yazılımı ile AO (Atomik orbital) tabanlı Siesta yazılımı BP (Siyah Fosforen) ile Alanine molekülünün etkileşimini ilk kez gerçekleştirmiştir. Aynı zamanda literatürdeki verilerle karşılaştırmak adına Adenine ve Guanine moleküllerinin etkileşim enerjileri de hesaplanmıştır. Daha sonra, hesaplama zamanını inceleyerek yazılımlar ve/ya da yöntemler arasındaki farklılıkları ortaya çıkarmaya ve sonuçların doğruluğunu bozmadan hesaplama zamanını düşürmeye yönelik çalışmalar yapılmıştır. Yapılan güncel bu tez çalışmamız, derleyicilerin ve yazılımların yeni sürümlerinin çok daha iyi performans sağladığını ve aynı zamanda derleyicilere ait parametrelerin ve çekirdek sayılarının etkili kullanımın hesaplama zamanına önemli ölçüde bir etkisinin var olduğunu göstermiştir.

Anahtar Kelimeler: İki Boyutlu Yapılar, MPI, Quantum Espresso, Siesta, Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı.

WAYS TO INCREASE OPTIMIZATION IN NANOSTRUCTURES MODELLING PROGRAMS

ABSTRACT

Since DFT (Density Functional Theory) came to existence, the computational nano science has become significant. The numerical calculations based on computers have focused on two main subject, computational accuracy and computational speed. In this work, we have compared PW (Plane wave) based QE (Quantum Espresso) Code and AO (Atomic Orbitals) based Siesta Code, which are both Open-Source, by performing the calculations of BP (Black Phosphorene)-Alanine molecule for the first time. Also we have calculated the binding energies of Adenine and Guanine molecules on the phosphorene to compare with previous results in the literature. Next, we have explored the difference between the codes and/or methodologies by analyzing computational speed, making efforts to decrease the consumed computational time without compromising calculation accuracy. Our current this study shows that the newer version of the suitable compiler yields to very promising results and also effective use of the cores and flags of the compiler have also a great impact on the computational time.

Keywords: Two Dimensional Structures, MPI, Quantum Espresso, Siesta, Density Functional Theory.

GİRİŞ

Hesaplamalı malzemeler biliminde, malzemelerin farklı özelliklerini anlamayı, bunların tasarımını gerçekleştirmeyi ve toplumun yararına ve ihtiyaçlarına uygun malzemeler tasarlamayı hedeflemekteyiz. Bu hedef ise matematik, kimya, fizik, bilgisayar ve malzeme bilimine dayalı teori ve algoritmalarla programlanan bilgisayarlar sayesinde modellenerek gerçekleştirilmektedir. Örneğin, bir metal ya da seramiğin topaklaşma davranışı normalde bir laboratuvar ortamında sıradan topaklaştırma fırını ile incelenebilmektedir. Fakat bu durum atomik boyutta moleküler dinamik hesaplamaları ile de yapılabilmektedir. Yazılımdaki giriş parametrelerini değiştirerek, eğer parametreler doğru bir şekilde girilmişse, etkili ve doğru hesaplama yapmak mümkün olabilmektedir [1].

Birçok durumda, bilgisayar ortamında hesaplama, yüksek basınç, yüksek sıcaklık vb. gibi laboratuvar ortamında yapılması oldukça güç olan durumlarda çalışmamıza imkân veren tek seçenek haline gelmektedir. Örneğin günlük yaşantımızda büyük öneme sahip olan cihazlara bir göz atabiliriz. Her gün kullandığımız cep telefonları, bilgisayarlar, tabletler vb. genellikle silikondan yapılan IC (Integrated Circuit) çipler sayesinde çalışmaktadırlar. Hesaplamalı malzeme bilimi kullanarak, daha hızlı, küçük ve hafif IC çiplerini geliştirebilir ve daha iyi şekilde tasarımlarını yapabiliriz. Dolayısıyla hesaplamalı malzemeler biliminin bu konudaki çalışmaların gidişatını önemli bir ölçüde değiştirebileceği oldukça açıktır. Pahalı ve karmaşık laboratuvar malzemelerinin yerini artık hesaplamalı bilim almaya başlamıştır [1].

Bilgisayarlar her yerde bulunmaktadır ve hayatımızı birçok farklı alanda değiştirmektedir. Bilgi teknoloji çağında, herhangi birinin kişisel bir bilgisayarı olmasa bile, gündelik hayatımız diğer çalışan yüzlerce bilgisayarın yaptığı işlere bağlıdır. Bilgisayarlar, hesaplamalı bilimi de aynı şekilde değiştirmiştir [1].

Bilgisayarlar, çoğunlukla sahip oldukları işlemcileri ile performanslarına etki ederler. Bu işlemciler içinde transistörler bulunmaktadır. Bu transistörler performansı etkilemektedir. Moore yasası bize entegre devrelerde birim alanda bulunan transistör

sayısının her iki yılda bir iki katına çıkacağını öngörmektedir. Performansı etkileyen bir diğer parametre ise işlemci saat hızlarıdır ve özellikle 2004 yılından sonra pek bir artış görülmemiştir. Çünkü gerekli olan güç miktarı artmıştır ve belli bir saat hızından sonra çok küçük değişikliklerde bile büyük miktarda güç gerekmektedir. Saat hızını arttırmak yerine birden fazla işlem birimi koymak daha makul gözükmeye başlamıştı. Çünkü hem performans artışı sağlamak hem de güç problemiyle baş edebilmek mümkün olabiliyordu [2-3].

Dolayısıyla, bazı karmaşık problemler sadece 10 tane çekirdek içeren iş istasyonlarında çözülebilmektedir. Dünyanın herhangi bir yerinde bulunan binlerce çekirdekli bilgisayarlarla bağlantı kurularak büyük ve karmaşık sistemlerin oluşturduğu sorunların üstesinden de böylece gelinebilir [1].

Bilgisayardaki çekirdeklerin bir problemi çözebilmesi için bir uyum içerisinde çalışması ve işi paylaşması gereklidir. Bu gibi zorluklar için standart bir fonksiyonlar takımını tanımlamak gereklidir ve bu, ilk olarak, 1991 yılında dağıtılmış bellek ortamı konulu bir çalışmada ortaya çıkan MPI kütüphanesi tarafından sağlanır [4].

Nanoyapıların örnekleme yazılımları da çoklu çekirdekli ortamlarda çalışabilmektedir. 2019 yılı başı itibari ile bu yazılımlardan yaklaşık 91 tane bulunmaktadır ve bunların 57 tanesi Fortran, 29 tanesi C ya da C++ ve geriye kalan 5 tanesi ise Python ya da başka programlama dili ile yazılmıştır. Yarısından fazlasında Fortran programlama dili tercih edilmektedir çünkü bu tarz yazılımların ortaya çıkmaya başlaması 90'lı yıllara dayanmaktadır ve o zamanlar Fortran programlama dili oldukça ilgi görmekteydi, bilimsel hesaplamalar için kullanılıyordu. Bu yazılımlardan 41 tanesi ücretsiz iken geri kalanları ya sadece akademisyenlere verilmekte ya da ticari olarak kullanılmaktadır. Önemli diyebileceğimiz VASP [5], CASTEP [6], WIEN2K [7], CRYSTAL [8] gibi ücretli yazılımların yanında QE [9], SIESTA [10], EXCITING [11], ABINIT [12] gibi ücretsiz yazılımlar da mevcuttur. Ücretli yazılımların literatürde kullanım sıklığı fazladır ve satış sonrası destek alabilme durumu çok daha iyidir. Fakat elde edilen sonuçlar aynıdır.

Malzemelerin ayırt edici çeşitli özelliklerini anlamak adına öncelikle bu özelliklerin arkasında yatan fizik yasalarını ve bu fizik yasalarının bilgisayar ortamında nasıl uygulandığını görmemiz gerekir.

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Hesaplamalı Nanobilimde Temel Fizik İlkeleri

Madde üzerine etkiyen dört temel kuvvet vardır ve evrenimiz bu kuvvetler ile yönetilmektedir. Bunlar elektromanyetik kuvvet, kütle-çekim kuvveti, atom çekirdeğinde gerçekleşen zayıf ve güçlü nükleer kuvvetler olmak üzere dörde ayrılır [1].

Atom çekirdeğindeki proton ve nötronları bir arada tutan güçlü nükleer kuvvetlerdir ve son derece kısa erişimlidir. Aslında elektrik kuvvetlerden yüz misli daha güçlü oldukları halde onları hissetmeyiz. Zayıf nükleer kuvvetler ise belirli bir radyoaktif parçalanmaya yol açar ve kısa erişimli olup elektromanyetik kuvvetlerden daha kısa mesafede etkilidir [13]. Kütle çekim kuvveti ise iki kütleli, birbiri üzerine, aralarındaki uzaklığın karesi ile ters orantılı ve kütlelerin çarpımı ile doğru orantılı olan etkidir [14].

Elektromanyetik kuvvetler ise elektrik ve manyetik alanlarla ilişkilidir. Elektrik yükleri arasında da kütle-çekim kuvvetine benzer bir durum söz konusudur. Ancak elektrik ve kütle-çekim kuvvetlerinin güçleri arasındaki fark muazzamdır. Elektrik kuvvetleri kütle-çekim kuvvetinden yaklaşık 10^{42} kat daha büyüktür [14]. Manyetik kuvvet ise manyetik alan yönüne dik olacak şekilde hareket eden yüke etkidir [13]. Günlük yaşantımızda, kütle çekim kuvveti dışında, karşılaştığımız kuvvetlerin hemen hemen hepsi elektromanyetik kökenlidir.

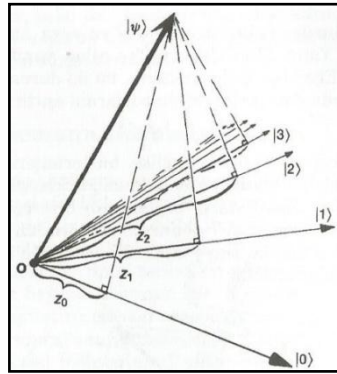
Atom ve moleküllerin davranışını anlamak için sadece elektromanyetik kuvvet ile ilgilenmek yeterli olacaktır çünkü diğerlerinin etkisi oldukça azdır. Maddeler içerisinde meydana gelen ne olursa olsun bu temel elektromanyetik etkileşim sayesinde gerçekleşmektedir. Ayrıca madde içindeki geçerli yasalar klasik fizik yasalarından oldukça farklıdır ve bu yüzden kuantum fiziği ve kuantum mekaniğine ihtiyaç duyulmuştur [1].

Kuantum mekaniğine dayalı hesaplama yöntemleri birinci ilke (First-Principles) ya da Başlangıçtan (Ab-initio) olarak adlandırılır. Çünkü bu hesaplamalarda sadece temel kuantum mekanik yasalarından yararlanır, başka herhangi bir deneysel vb. verilerden yararlanmaz. Malzemelerin özellikleri bu yasaların sayısal çözümlerinden elde edilmektedir [1].

Kuantum mekaniği maddenin tüm ayrıntılarıyla, özellikle atomik ölçekteki davranışının betimlenişidir. Çok küçük ölçekteki nesnelere, herhangi bir direkt deneyime sahip olduğumuz şeylerin hiçbirisi gibi davranmaz. Dalgalar gibi davranmazlar, parçacıklar gibi de davranmazlar, bulutlar gibi ya da bilye topları gibi veya yayların uçlarındaki ağırlıklar gibi de davranmazlar; şu ana kadar gördüğümüz hiçbir şey gibi davranmazlar [15].

Bununla birlikte, elektronların tıpkı ışık gibi davrandığı şansa sahipiz. Atomik nesnelere (elektronlar, protonlar, nötronlar vb. gibi) kuantum davranışı hepsi için aynıdır, onların hepsi “parçacık dalgaları”dır ya da onları nasıl adlandırırırsanız odur [15].

20. yüzyılın ilk çeyreği boyunca atomik ve küçük ölçekli davranış hakkında yavaş yavaş toplanan bilgi, küçük nesnelere nasıl davrandıklarıyla ilgili bazı belirtiler verdiyse de, gittikçe artan bir karışıklıkta yaratmıştı. Bu karışıklık, en sonunda 1926 ve 1927’de Schrödinger, Heisenberg ve Bohr tarafından çözüldü. Bu fizikçiler nihayet maddenin küçük ölçekteki davranışı için tutarlı bir anlatım elde ettiler [15]. Şimdi kuantum dünyasında yasaların nasıl şeyler olabileceğini göstermeye çalışalım.



Şekil 1.1. Dalga fonksiyonu ve durum vektörlerinin gösterimi [16]

$|\Psi\rangle$ dalga fonksiyonu bir parçacığın ya da sistemin durumunu temsil eder ve parçacıkların genel olarak bir ölçüm yapıldığı kadar konum, momentum, enerji, açısal momentum gibi belli dinamik özellikleri yoktur. Herhangi bir deneyde herhangi bir değeri elde etme olasılığı $|\Psi\rangle$ 'nin istatistiksel yorumu ile belirlenir [17]. Sistemin dalga fonksiyonu olası tüm durumların lineer kombinasyonu ile betimlenir. Bu durumlar $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$ ile Şekil 1.1'de gösterilmektedir ve bunların her biri birbirine diktir. z_0, z_1, z_2, \dots ise karmaşık sayılardır. Dalga fonksiyonu böylece aşağıdaki gibidir [16].

$$|\Psi\rangle = z_0|0\rangle + z_1|1\rangle + z_2|2\rangle + \dots \quad (1.1)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n z_n |n\rangle \quad (1.2)$$

Ya da x, y, z koordinatlarına göre tanımlarsak;

$$\Psi(x, y, z, t) = \sum_n z_n \psi_n(x, y, z, t) \quad (1.3)$$

Bir sistem (Bunun durumu $|\Psi\rangle$ olsun, yani tüm olası durumlar üst üstedir) üzerinde ölçme yaptığımızda, taban kümesinin ölçmeyle saptanmış eksenlerden ($|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$) birine atlar. Bu seçim sadece olasılıkla belirlenir ve bu öngörülen olasılıklar sırasıyla $|z_0|^2, |z_1|^2, |z_2|^2, \dots$ ile orantılı olacaktır. Doğanın hangisini seçeceğini bize bildiren dinamik bir yasa yoktur [16].

Ölçme işlemi ise operatörlerle (toplam enerji operatörü H) yapılır. Operatör burada dalga fonksiyonuna etki ettiğinde (yani ölçüm yapıldığında), yukarıda bahsedildiği gibi, ilgili olasılığa bağlı olarak taban kümesinden birine atlar ve özdeğer (Yani gözlenebilir toplam enerji E) elde edilir. Bu işlem aşağıdaki gibi bir eşitlik halini alır.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(x, y, z, t) = H \Psi(x, y, z, t) \quad \& \quad H|n\rangle = E_n |n\rangle \quad (1.4)$$

Bu eşitlik zamana bağlı Schrödinger denklemi olarak bilinir.

Burada bazı açıklamalar yapmalıyız. Bunlardan ilki, nano yapı örnekleme yazılımlarında, sadece taban durumu ($|0\rangle$ ve elektronlar 0 Kelvin sıcaklıkta) ile ilgileneceğiz. Çünkü malzeme biliminde karşılaşılan problemlerin en pratik

çözümünü bu taban durumu sağlamaktadır [1]. Ayrıca ayrılabilen çözümler – toplam enerji gibi – zamandan bağımsızdırlar. O zaman eşitlik;

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle \quad (1.5)$$

ya da

$$H\psi_0(x,y,z) = E_0\psi_0(x,y,z) \quad (1.6)$$

Olur. İşte nanoyapı hesaplamalarında E_0 özdeğerini elde ederek sistemin toplam enerji değerini bulmuş oluyoruz. Şimdi sırada çok parçacıklı sistemler için H ve $\psi_0(x,y,z)$ ifadelerini uygun bir şekilde yazmak vardır.

1.1.1. Çok parçacıklı sistemlere uygun hamiltonyen

Hamiltonyen sistemin kinetik ve potansiyel enerjilerinin toplamıdır. Çok parçacıklı sistemlerde kinetik enerji atom çekirdeği ile elektronların hareketinden kaynaklanır. Potansiyel enerji ise çekirdek-elektron, çekirdek-çekirdek ve elektron-elektron etkileşiminden kaynaklı Coulomb etkileşiminden gelmektedir.

Çok parçacıklı sistemler için hamiltonyen ifadesini yazmak gerekirse aşağıdaki gibi olacaktır.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{R}_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (1.7)$$

R_i noktasındaki iyonun kütlesi M_i , r_i noktasındaki elektronun yükü ise m_e 'dir. İlk terim iyonların kinetik enerjisi, ikinci terim elektronların kinetik enerjisidir. Elektronlarla iyonlar arasındaki Coulomb etkileşimi 3. Terim, elektron-elektron etkileşimi 4. Terim ve iyon-iyon etkileşimi ise 5. Terimdir.

Böylesine bir Hamiltonyen oldukça karmaşık gözükmektedir. Elektronların ve iyonların sayısı çok çok küçük olmadığı sürece (genelde 4 ten küçük), böylesine bir Hamiltonyene sahip Schrödinger denklemini en büyük ve en iyi bilgisayarlarla bile çözmek imkânsızdır [18].

Bunun üstesinden gelmek adına, önemli bazı yaklaşımlar yapılmalıdır. Bunlardan ilki iyonları hareketsiz gibi kabul etmektir. İyonların kütleleri elektronların kütlelerinden yaklaşık 1835 kat daha fazladır. Dolayısıyla elektronlar iyonlara göre çok daha hızlı olacaktır. O zaman iyonları hareketsiz kılacak şekilde belli noktalarda belirtebiliriz. İyonların bu durumda dalga fonksiyonuna etkisi olmayacağından elektronlara etki eden pozitif bir yük kaynağı olacaktır. Bu BO (Born–Oppenheimer) yaklaşımı olarak bilinir [1]. Böylece sadece elektronların durumuna odaklanabiliriz.

Peki, BO yaklaşımının Hamiltonyene etkisi nedir? İyonlar hareketsizdir ve dolayısıyla kinetik enerjileri sıfır olur. Böylece ilk terim ortadan kalkmaktadır. Son terim de sabit hale gelmiş oluyor. O zaman sadece elektronların kinetik enerji, e-e etkileşiminden dolayı bir potansiyel enerji ve çekirdeklerden kaynaklı bir dış potansiyel elimizde kalmış oluyor [1]. Bunu

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.8)$$

$$T = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} \quad (1.9)$$

$$V_{ee} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.10)$$

$$V_{dış} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.11)$$

$$H = T + V_{e-e} + V_{dış} \quad (1.12)$$

şeklinde yazabiliriz.

Bu ifadeye baktığımızda tek sahip olabileceğimiz bilgi sistemin elektron sayısı ve dış potansiyeldir. Kinetik enerji ve elektron-elektron etkileşimi ise sistemden bağımsızdır.

1.1.2. Çok parçacıklı sistemlere uygun dalga fonksiyonu

Denklem (1.8)'de var olan Hamiltonyen ile Denklem (1.6)'yı çözümler tam olarak sistemin dalga fonksiyonunu bulur ve buradan da enerji özdeğerine ulaşabiliriz. Fakat çok parçacıklı sistemler için böylesi bir şeyi yapmak şu anki süper bilgisayarlarla bile imkânsızdır. Bu sorun çok-parçacık problemi olarak adlandırılır. Tabiki bu sorunun üstesinden gelmek için başka yaklaşımlarda bulunacağız. Bunlardan ilki BO yaklaşımıdır. Bu yaklaşımda sadece Hamiltonyen değil aynı zamanda dalga fonksiyonu da sadece elektronun durumuna bağlı hale gelir [1].

Bu durum dalga fonksiyonu hakkındaki bilinmezliği ortadan kaldırmıyor. Sonuçta burada E hakkındaki tüm gerekli bilgiler $\psi_0(x,y,z)$ taban durumu dalga fonksiyonunda mevcuttur ve bu dalga fonksiyonu da H operatörün uygulanması ile ortaya çıkmaktadır. Sistemin doğru taban dalga fonksiyonunu bilmeden bu problemin üstesinden nasıl gelebiliriz? Bunun üstesinden varyasyon yöntemini kullanarak gelebiliriz. Varyasyon yöntemi, deneme bir dalga fonksiyonundan yola çıkarak Hamiltonyenin beklenen değerini hesaplırsak elde edilen sonucun en düşük enerji değerine eşit ya da daha büyük olacağını söyler. Deneme dalga fonksiyonunun parametreleri değiştirilerek en düşük enerji değere ulaşırsa sistemin gerçek taban durumu dalga fonksiyonu parametreleri de bulunmuş olur [20]. O zaman geriye çok parçacıklı sistemler için dalga fonksiyonunun nasıl oluşturulması gerektiğini bilmek kalıyor.

1.1.3. Hartree yöntemi

Çözümü daha basit hale getirmek adına, her bir parçacığı diğerleri ile teker teker etkileşimini bir kenara bırakmalıyız. Her bir parçacığı bağımsız olarak düşünmeli ve bu elektronların sanki ortalama bir yük yoğunluğu denizinde hareket ediyormuş gibi hissetmesini sağlamalıyız. Başka bir deyişle, her bir elektronun diğerler parçacıkları tek bir parçacık gibi değil de ortalama alan (mean field) olarak görmesini sağlamaktır. Elektronlardan kaynaklı bu alanın oluşturduğu potansiyel ise Hartree potansiyeli olarak adlandırılır ve bu Hamiltonyende V_{e-e} yerini alır [1].

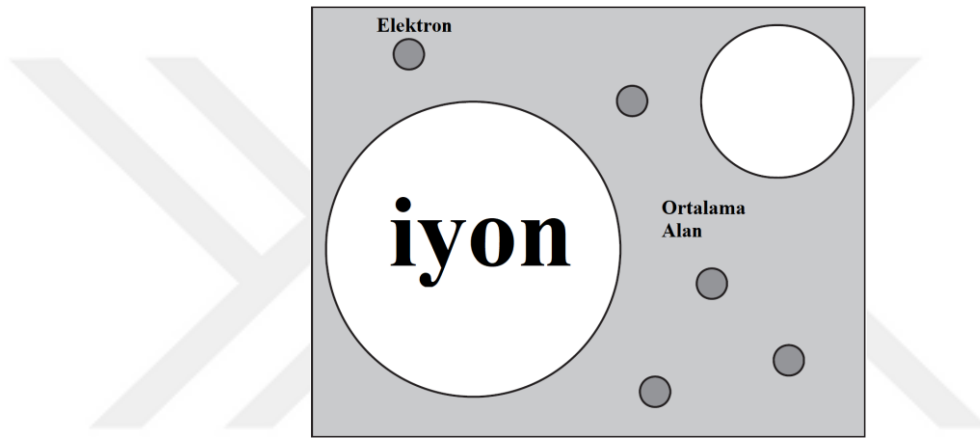
Bu yöntemde dalga fonksiyonu ve enerji ifadesi aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots E_N \quad (1.13)$$

$$\Psi = \Psi_1 \Psi_2 \Psi_3 \dots \Psi_n \quad (1.14)$$

Burada N ile ifade edilen sistemin toplam elektron sayısıdır. Dalga fonksiyonu ise her bir elektron için deneme bir fonksiyon ile temsil edilir.

Burada elde edilenler Schrödinger denkleminde yerine yazılır. Denklem kurulduktan sonra varyasyon ilkesi istenilen parametreler elde edilene kadar uygulanır. Böylece tek parçacıklı denklemler seti elde edilir.



Şekil 1.2. Hartree yönteminde çok parçacıklı sistemin tasviri [1]

Fakat bu yöntem kuantum mekaniğinin iki temel özelliğini yok saymaktadır. Bunlardan biri antisimetri prensibi ve buna bağlı olarak diğeri de Pauli dışarlama ilkesidir [1].

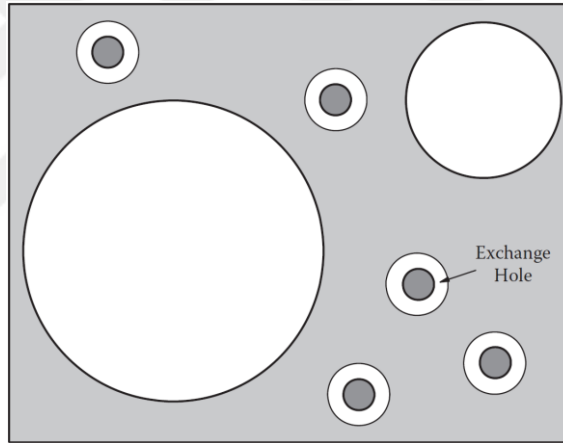
Pauli dışarlama ilkesi: Elektronların spin özellikleri vardır ve bu elektronun kendi eksenini etrafında dönmesine benzer. Pauli'den önce bir elektronun durumu üç kuantum sayısı ile belirlenmişti. İşin içine elektronun spinini girince bu rakam dört oldu. Pauli ilkesi bize iki veya daha fazla elektronun aynı kuantum sayılarına sahip olamayacağını söyler. Yani ilk üç kuantum sayısı aynı olan iki elektronun spinleri aynı sayılı olamaz [21]. Elektronların spin özelliklerinin de işin içine katılması Slater determinantı ile mümkündür.

1.1.4. HF (Hartree-Fock) yöntemi

Bu yöntemde sistemin dalga fonksiyonu Slater determinanı ile oluşturulur ve böylece gerekli olan antisimetri ilkesi ile uyumlu hale gelir. N elektronlu bir sistem için Slater determinanı aşağıdaki gibidir.

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{pmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_n(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(r_n) & \dots & \psi_n(r_n) \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

Bu ilke aynı zamanda Hamiltonyende fazladan bir terim gerektirmektedir ve bu değiş-tokuş enerjisi olarak adlandırılır. Bu enerji eksi işaretlidir çünkü aynı spinlerin birbirini itmesinden kaynaklıdır. Değiş-tokuş boşluğu (Exchange-Hole) aynı spinli elektronları belli bir mesafede tutabilmekte ve itici etkiyi düşürmektedir [1].



Şekil 1.3. HF yönteminde çok parçacıklı sistemin tasviri [1]

Bilindiği üzere, çok parçacıklı bir sistemin dalga fonksiyonu parametrelerini bilemiyoruz. Burada yapılan şey tahmin et – hesapla – karşılaştır yöntemidir. Başta tahminen yazdığımız parametreler ile hesaplama sonucu elde edilen parametreler makul bir hassasiyete ulaşınca kadar hesaplamaları devam ettirmeye dayalıdır. Yani varyasyon yöntemi ile en düşük enerjili durumu bulana kadar dalga fonksiyonu parametrelerini değiştirmeliyiz [1]. HF yönteminde toplam enerji fazla çıkmaktadır. Bunun sebebi korelasyon etkisidir ve spin durumlarının bu sefer farklı olmasından kaynaklı bir durumdur. DFT yönteminde bunun üstesinden gelinmektedir.

1.1.5. Yoğunluk fonksiyonel teorisi

HF yaklaşımında dalga fonksiyonu çözümleri aranmaktadır, ancak çok parçacıklı sistemlerde sistemi oluşturan her bir parçacık için ayrı ayrı dalga fonksiyonlarının çözümü gerekmektedir. Bu dalga fonksiyonları ile kurulacak Slater determinantı üzerinden beklenen değerleri bulmak hesap yükünü oldukça arttırmaktadır [24].

DFT, 1964 tarihli HK (Hohenberg ve Kohn) [22] teoremlerine dayanır. 1965 yılında KS (Kohn ve Sham) [23], DFT için çok parçacık problemini, HF yaklaşımını andıran bir biçimde, etkileşmeyen parçacıklar sistemine dönüştüren bir çözüm önerdiler. DFT, değiş-tokuş ve korelasyon etkilerini de içermesi ile metal, yarıiletken ve yalıtkanın temel durum özelliklerini başarıyla açıklayabilmektedir. Bu sayede kısa sürede katıhal fiziği hesaplamalarında çok kullanılan bir teorem haline gelmiştir [24].

DFT'nin temelinde HK tarafından öne sürülen iki teorem vardır. Bu teoremler, harici bir potansiyelin etkisi altındaki etkileşimli elektron gazının temel durumu için yaptıkları çalışmaya dayanır. Bu çalışmada, elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olarak sistemin toplam enerjisinin hesaplanabileceği ve bu toplam enerji fonksiyonelinin minimum değerinin temel durum enerjisi olduğu ifade edilmiştir [24].

Fakat yapılan yaklaşım hala istenildiği gibi değildir. Hamiltonyende kinetik enerjinin elektronik yoğunluğa bağlı olarak açık ifadesini bilinmiyor ve hesaplanamıyor olması, DFT'nin pratik bir hesaplama aracına dönüşmesindeki en önemli engel olmuştur. DFT'nin kuramsal bir çerçeveden pratik hesaplama aracına dönüşmesi 1965 yılında KS tarafından kinetik enerji fonksiyonelinin hesaplanmasında ileri sürülen metot ile gerçekleşmiştir [24].

Buradaki temel düşünce, birbiriyle etkileşim halinde olan elektronların, birbiriyle etkileşmeyen ancak birbiriyle etkileşen asıl sistemle aynı elektronik yoğunluğa sahip bir sistem olarak ele alınması ve kinetik enerji fonksiyonelinin bu yeni etkileşmeyen sisteme göre tanımlanmasıdır. Bu yeni sistemde elektronlar birbirleriyle etkileşmiyor ancak sistemin yük yoğunluğunu değiştirmeyecek şekilde bütün elektronlar ortak bir dış potansiyele maruz kalmaktadır [24].

Bu yüzden elektronların kinetik enerjilerini ikiye ayırmalıyız.

$$T=T_s+T_c \quad (1.16)$$

Burada T_s birbiriyle etkileşmeyen elektronların kinetik enerjisi ve T_c ise korelasyon etkisidir. HF yönteminde dâhil edilmeyen budur.

HF yönteminde elektron-elektron etkileşimini -spinlerden ötürü- iyi tanımlamak için E_x (değiş-tokuş enerjisi) dâhil edilmişti ve elektron-elektron etkileşimi için enerji aşağıdaki gibi olmuştur.

$$E_{ee}=E_x+E_H \quad (1.17)$$

Denklem (1.12)'deki hamiltonyen ifadesinin yerine yukarıdakileri yazarsak o zaman hamiltonyen;

$$H=T_s+E_H+V_{dış}+T_c+E_x \quad (1.18)$$

$$E_{xc}=T_c+E_x \quad (1.19)$$

$$H = T_s+E_H+ V_{dış} + E_{xc} \quad (1.20)$$

şeklinde olur [25]. E_{xc} , değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim enerjisidir. Bu enerji için yaklaşımlar yapılmalıdır. Genelde LDA (Bölgesel Yoğunluk Yaklaşımı) ve GGA (Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı) kullanılır. LDA yaklaşıklıkta temel düşünce, homojen olmayan bir elektron gazı içinde yerel homojen özellik gösteren elektron gazı varsayımına dayanmakta ve homojen elektron gazına karşılık gelen tam (exact) tanımlı değiş-tokuş deşigi kullanılmaktadır.

LDA yaklaşıklığı sabit yük yoğunluğu için iyi sonuçlar verirken, atom ve molekül gibi yük yoğunluğunun hızlı değişim gösterdiği sistemlerde yetersiz kalmaktadır. GGA, molekül ve atom grupları gibi sistemlerin elektronik yapılarının daha iyi betimlenebilmesi için LDA değiş-tokuş korelasyonları üzerinde, gradyent düzeltmelerini içeren yaklaşıklıktır.

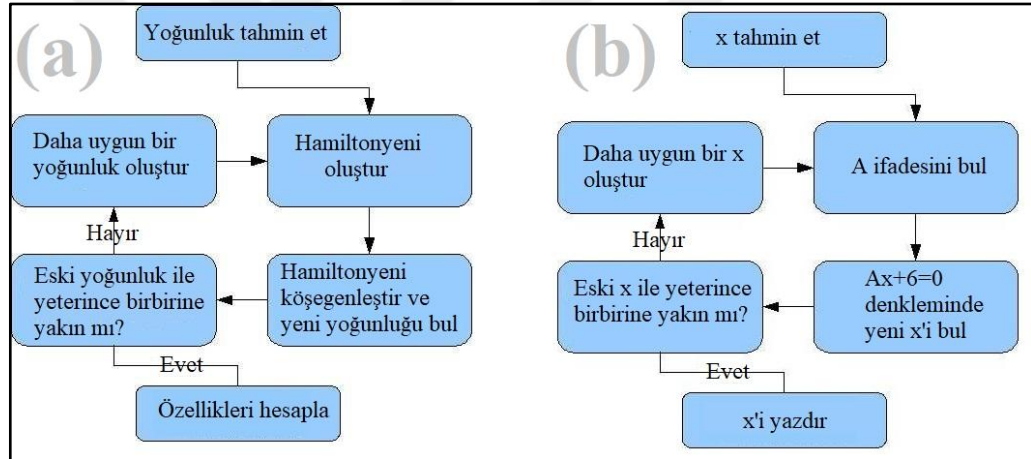
Böylece Denklem (1.6) aşağıdaki hale gelir.

$$H_m \phi_m(r) = \epsilon_m \phi_m(r) \quad (1.21)$$

1.1.6. SCF (Öz-uyumlu alan) Yöntemi

Bölüm 1.1.4'de bahsedilen tahmin et – hesapla – karşılaştır yöntemi daha iyi açıklayalım.

Diyelim ki $x^3 - 7x + 6 = 0$ şeklinde 3. dereceden bir denkleminiz var. Bunu çözmek kolay gözükmemektedir. Denklemi $(x^2 - 7)x + 6 = 0$ şeklinde düzenleyerek bu sorunun üstesinden gelebiliriz. Daha sonra parantez içerisindeki ifadeyi bildiğimizi varsayalım ve buna A diyelim. O zaman $Ax+6=0$ şeklinde bir denklem elde etmiş oluruz. Burada x ifadesini bulmak oldukça kolay gözükmemektedir. Eğer x ifadesini bilirsek $(Ax+6=0)$ A'yı, A ifadesini $(A= x^2 - 7)$ de bilirsek x'i bulabiliriz. Geriye yeni x ile eskisini karşılaştırmak kalır. Eğer değerler yeterince birbirine yakınsa x bulunmuş olur. Bu anlatılanlar Şekil 1.4-b'deki algoritmada verilmiştir.



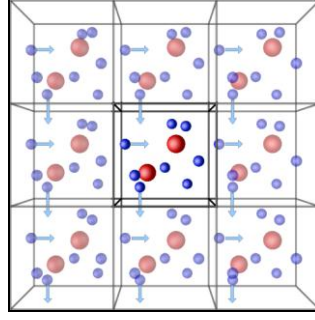
Şekil 1.4. (a) DFT ve (b) 3. derece denklem çözümü için scf algoritması

Benzer işlemi DFT'de sistemin taban durum yoğunluğunu bulmak için yaparız.

1.1.7. PBC (Periyodik sınır şartı)

PBC, bir kristali sonsuz sayıda (teoride) kendini tekrar eden en küçük hücre ile tanımlamadır. Sadece en küçük hücreden elde edilen veriler yardımıyla tüm kristalin özellikleri elde edilebilir.

Siesta ve QE, PBC uygular. Şekilde görüldüğü üzere tüm hücreler aynıdır ve her biri diğeri ile etkileşim halindedir. Böylece belli bir molekül/kristal ortamı yaratılmış olur.



Şekil 1.5. Periyodik sınır şartı

1.1.8. Temel setler

KS orbitalleri herhangi bir şekilde olabilirler ve onları matematiksel olarak tanımlamak pek kolay değildir. PW (düzlem dalga) ve AO (atomik orbital) gibi bilinen basit fonksiyonların lineer kombinasyonları ile bu orbitalleri tanımlarsak özellikle bilgisayar ortamı için işler daha da kolaylaşır [1].

1.1.8.1. Düzlem dalga yöntemi ile çözümler

QE, VASP gibi yazılımlar düzlem dalgaya dayalı setler kullanarak işlem yaparlar. Düzlem dalgalar ortogondur ve hızlı Fourier dönüşümü ile işlemler gerçekleşir. Birbirleriyle etkileşmeyen parçacıklar için KS ifadesi Denklem (1.15)'teki gibidir. ϕ_m ifadesini elde edebilmek için gerekli olan c_p^m katsayılarını, ϕ_p^b temel setleri dahilinde bulmak yukarıdaki eşitliği çözmek demektir.

$$\phi_m = \sum_{p=1}^P c_p^m \phi_p^b \quad (1.22)$$

Hamiltonyen matrisinin köşegenleştirilmesi P özdeğerlerini ve verilen sette her bir öz durumu ifade eden P tane katsayıyı bize verir. P ne kadar büyük olursa o kadar iyi özfonksiyonlar elde edilir fakat bu işlem daha çok zaman alır. (Burada m orbital sayısı, (n) ve k noktaları sayısı (k) içerir=n,k)

Denklem (1.23), Denklem (1.22)'ye benzemektedir.

$$\psi_k(r) = \sum_G \alpha(k,G) \exp(i(k+G).r) \quad (1.23)$$

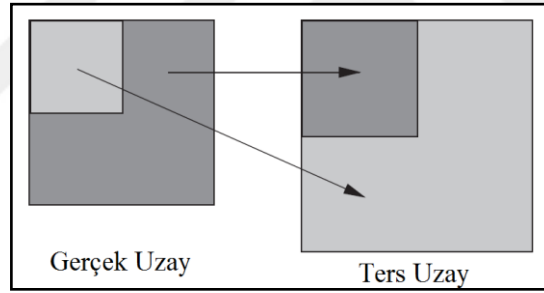
P yerine G ters uzay vektörü bulunur ve özdeğerleri tanımlamada etkilidir. Yukarıdaki ifade tek bir özdeğer (orbital) için geçerlidir. Aşağıdaki ise tüm sistem için tanımlanır. İşte burada $\alpha(k, G, n)$ katsayıları bulunduğu zaman çözüme ulaşılır.

$$\psi_k^n(r) = \sum_G \alpha(k, G, n) \exp(i(k+G).r) \quad (1.24)$$

Özellikle kristal sistemleri için düzlem dalga kullanmak oldukça etkilidir. Örneğin Silikonda iyi bir sonuç elde edebilmek için 50-100 tane düzlem dalga kullanmak yeterli olacaktır. [26].

Burada k (k vektörü) ve G (ters uzay vektörü) ile ilgili bilgi vermeliyiz.

K uzayı ve K noktaları: K uzayı ters uzay olarak bilinir ve fizikte çok önemli bir yere sahiptir. Şekilde gösterildiği gibi, gerçek uzayda artan uzunluk, alan ya da hacim ters uzayda azalacaktır. Bunun tam terside geçerlidir.



Şekil 1.6. Gerçek uzay ile ters uzay arasındaki ilişki [1]

Hesaplamaları k uzayında (ters uzay) yapmak alışkanlık haline gelmiştir çünkü hem hesaplamalarda kolaylık sağlamakta hem de bazı fiziksel nicelikleri açıklamak mümkün olmaktadır.

PBC sayesinde, örneğin bir kristal sistemini sadece en küçük hacimde hesap yaparak tanımlayabiliyorduk. Bazı hesaplamaları ters uzayda yapmak daha uygun olduğundan bu bölgenin ters uzayını da dikkate almak gerekir. Dolayısıyla ters uzaydaki en küçük hacimli ve kendini tekrar eden bölgeyi bulmalıyız. Bu bölge Brillouin bölgesi olarak adlandırılır ve katıhal fiziğinde çok önemli bir yere sahiptir. Hesaplamalar bu bölge üzerinden integral alınarak yapılır.

K noktaları, Brillouin bölgesi integralini nümerik olarak tanımlamak adına geliştirilmiş bir yöntemdir. Yani bu integral yerine noktalar topluluğu düşünülmüştür. Ters uzayda büyük hücre için gerekli olan k noktaları sayısı küçük hücrelere göre daha fazla olmayı gerektirir. Çünkü ters uzayda büyük hücrelerin gerektirdiği nokta sayısı doğal olarak küçüklerine göre daha fazla olacaktır.

E_{cut} (Kesilim Enerjisi): Aşağıdaki eşitlikte Fourier Serisi verilmiştir. Fourier serisinde uygun katsayılar ve n değerleri kullanarak herhangi bir dalgayı temsil edebilir hale getirebiliriz. Yukarıda verilen eşitlikte n değeri sonsuza kadar gitmektedir ve bu da sonsuz kadar işlem anlamına gelir. Sonsuz kadar işlem yapamayacağımızdan bu n değerine bir yerde kesmek gereklidir.

$$f(x)=a_0+\sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n\cos\frac{n\pi x}{L}+b_n\sin\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (1.25)$$

Benzer durum nanobilmimde elektronların kinetik enerjisi için de geçerlidir. KS eşitliğinde elektronların kinetik enerjisi sonsuz kadar G değerinin toplamı ile tanımlanır. Bu durum Fourier serisine oldukça benzemektedir ve burada da belli bir yerde bu sonsuzluğu sonlu hale getirmek gerekir. Bu sınır kesilim enerjisidir. Bu değeri çok küçük almak orbitalleri düzgün bir şekilde tanımlayamayacaktır. Çok fazla alınması ise hesaplama süresini uzatacaktır. Bu sebeple bu değerın problemin doğasına uygun şekilde optimize edilmesi önemlidir.

1.1.8.2. Atom merkezli orbital yöntemi ile çözümler

LCAO (Atomik orbitallerin lineer kombinasyonu) diye adlandırılan bu yaklaşımda, atomik orbital olarak adlandırılan kısım aslında gerçek atomik orbitaller değillerdir. Bunlar Yarıçapsal (radyal) fonksiyonlar üssel, Gaussians ya da herhangi bir yerleşmiş fonksiyon olabilirler ve bunlar s,p,d,f gibi açısal momentum fonksiyonları ile çarpılabilirler. Gaussian bazlar analitik matris elementlerini sağlama gibi özel avantaja sahiptir. Fakat Gaussian bazları düzlem dalgalarda olduğu gibi uygulamak kolay değildir. Sistemin durumlarını açıklamak için pek çok indeks kullanmak gereklidir. Ayrıca yakınsama düzlem dalgalarda olduğu gibi tek bir parametre ile kontrol edilememektedir. Örneğin sistemdeki bir atom hareket ettirilirse, her bir yeni durum için setler optimize edilmelidir. Dahası hangi temel

fonksiyonların gerektiği tam olarak bilinmemektedir ve en iyi sonucu elde edebilmek için daha çok test yapmak gerekir. Diğer taraftan, bu bazlarda daha küçük matrisler olduğundan gerekli bellek ve köşegenleştirme süresi düzlem dalga yöntemine göre daha azdır [27].

Gaussian tipi orbital aşağıdaki gibidir. Açısal momentum a,b ve c ile kontrol edilmektedir. ξ , orbitalin genişliğini kontrol etmektedir.

$$\phi_{abc}^{CGTO}(x,y,z)=N \sum_i c_i x^a y^b z^c e^{-\xi r^2} \quad (1.26)$$

Bir diğer seçim ise STOs (Slatter-tipi orbitaller) dir ki bunlar basit orbitali tanımlamak için $r^l e^{-\xi r}$ tipini kullanırlar [28].

NAOs (Nümerik atomik orbitallerde) ise farklılık yarıçapsal örgüler analitik olarak değilde nümerik olarak temsil edilirler. Bu durumda hesaplama süresi uzamaktadır fakat gerekli olan integrasyon ifadeleriyle gerçekleştirilir. Bu tip orbitallerde fazladan zaman maliyeti olmaksızın istenilen bir şekilde tasarlanabilir [28].

Siesta yazılımı orbitalleri NAOs yöntemi ile belirler. Genelde 3 farklı tipte kullanılır. Bunlar SZ, DZ ve DZP'dir.

SZ (Single Zeta) : her bir atomik orbital için tek fonksiyon

DZ (Double Zeta): her bir atomik orbital için iki fonksiyon

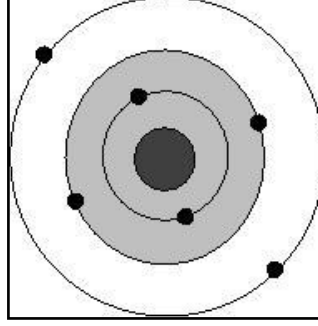
Örneğin karbon atomu için 1s, 2s, 2px, 2py, 2pz olmak üzere toplam 5 atomik orbital tanımlanmaktadır. SZ için bu 5 fonksiyon gerektirirken, DZ için bu değer 10 olacaktır.

DZP (Double Zeta Polarization): DZ ye ek olarak polarizasyon fonksiyonu dâhil olur. Atomik orbital polarize olmak isteyebilir. Bu durum için gereklidir.

1.1.9. PP (Yapay potansiyel)

PP çalışma sürelerini azaltmak için geliştirilmiştir. Bir atomda bulunan her bir elektron bağlanmada etkili bir rol oynamaz. Bu elektronlar öz (kor) elektronları olarak adlandırılırlar ve KS denkleminin çözümüne dâhil edilmezler. Böylece

işlemlerimizi daha kısa bir zamanda yapma imkânına sahip oluruz. Tabi bunu yaparken kor elektronlarının sisteme etkisi tamamen yok sayılır. Bunun yerine kor elektronları için yapay bir dalga fonksiyonu ve potansiyel oluşturmak gereklidir.



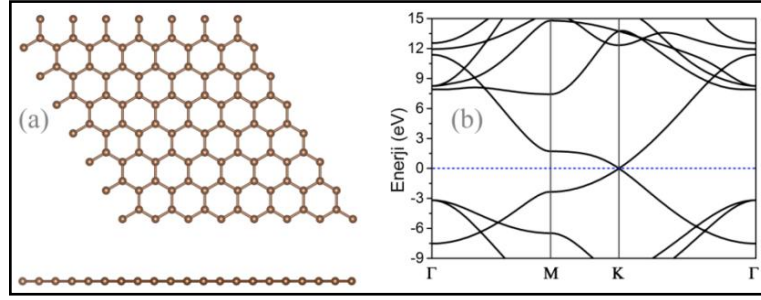
Şekil 1.7. Çekirdek, öz (kor) elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş bir atom [29]

Örneğin $1s^2 2s^2 2p^2$ elektronik dizilimine sahip karbon atomunda, $1s^2$ ve $2s^2$ yörüngelerindeki elektronlar kor elektronlarıdır. Bu elektronlar genellikle çekirdeğin çevresinde yerleşirler. Çekirdekle kor elektronlarının oluşturduğu sisteme iyon kuru denir [29]. Yöntem kısmında hangi yapay potansiyellerin kullanıldığı belirtilmiştir.

1.2. Hesaplanan Malzemenin Literatürdeki Önemi

Andre Geim ve arkadaşları 2004 yılında bilim dünyası için çok önemli olan Grafeni ilk kez sentezlemişlerdir ve bundan ötürü de 2010 yılında Nobel ödülüne layık görülmüşlerdir [30-31]. Grafen, bir atom kalınlığında iki boyutlu malzeme olup bal peteğine benzer bir dizilime sahiptir ve sadece karbon (C) atomlarından oluşmaktadır (Şekil 1.8-a) [32]. Bilim insanları sadece Grafen ile yetinilmeyeceğini düşünmüş ve eşsiz özelliklere sahip yeni iki boyutlu malzemeleri keşfetmek adına hem teorik hem de deneysel çalışmalar yapmaya başlamışlardır.

Bu zamana kadar yürütülen çalışmalarda, bal peteği yapısına sahip Grafen (C) ile birlikte Si (Silisen) [33], Ge (Germanen) [34], h-BN (Boron-Nitrat) [35], Sn (Stanen) [36], P (Fosforen) [37] gibi kararlı yapıların farkına varılmıştır. Bu malzemelerin en önemli yanlarından biri de molekülleri tutabilme özelliğidir.



Şekil 1.8. (a) Grafenin üstten ve yandan görünüşü, (b) Grafenin elektronik band yapısı. Mavi ile gösterilen Fermi seviyesidir.

İki boyutlu malzemelerin moleküllerle etkileşimi onları sadece iyi bir algılayıcı yapmakla kalmıyor aynı zamanda elektronik ve kimyasal özelliklerini de değiştiriyor [38]. Son zamanlarda iki boyutlu malzemelerden en dikkat çeken P olmuştur. Fosfor atomlarından oluşan bu iki boyutlu yapının kararlı iki adet farklı yapısı mevcuttur. BP (Siyah fosforen) ve Mavi fosforen olarak adlandırılan bu yapılardan en kararlı olanı BP'dir [39]. Bu durum ilgili bilgisayar yazılımları sayesinde ortaya çıkmıştır ve deneysel olarak böylesine bir yapının da varlığı gösterilmiştir [40]. Fosforen, genellikle, alan etkili transistör, Lityum-iyon bataryaları, spintronik malzemeler ve gaz (molekül) algılayıcıların kullanımı için uygun olabileceği gösterilmiştir [40]. Ayrıca literatürdeki çalışmalar göstermektedir ki bu yapının 1.5 eV'luk doğrudan band aralığı vardır, yüksek taşıyıcı mobiliteye sahiptir ve mekanik olarak güçlüdür [41]. Bu özellikler ise BP'i diğerlerinden farklı kılmaktadır.

Özellikle kuramsal çalışmalar BP'nin birçok molekülle etkileşimine odaklanmıştır ve algılayıcı olarak iyi bir şekilde kullanılabileceğini göstermiştir [42-44]. Bizde bu sonuçlardan yola çıkarak daha önce çalışılmamış ve literatüre güzel bir katkı sağlayacağını düşündüğümüz Alaine molekülü ile etkileşimini inceledik.

Alanine ($C_3H_7NO_2$), Beta ve Alfa olmak üzere ikiye ayrılır. Alfa-Alanine en küçük aminoasittir ve bağışıklık sistemini güçlendirici etkisi vardır. Beyne, kas dokularına ve merkezi sinir sistemine enerji sağlar. Bunun yanında Beta-Alanine ise atletler arasında oldukça popülerdir. Çünkü egzersiz performansını olumlu etkileyen L-carnosine konsantrasyonunu arttırabilme özelliğine sahiptir [45-46]. Böylesi moleküllerin yüzeylerle etkileşimini incelemek literatüre önemli katkı sağlayacaktır.

Ayrıca hesaplamaları literatürler karşılaştırmak adına Guanine ($C_5H_5N_5O$) ve Adenine ($C_5H_5N_5$) molekülleri de hesaplamalara dâhil edilmiştir.

1.3. Bilgisayar Ortamında Çözümlenmeler

KS denkleminin çözümünde amacımız Hamiltonyenin en düşük enerjili özdeğerlerini bulmaktır. Eğer temel setleri kullanmak gerekirse hamiltonyen köşegenleştirilerek öz değer ve öz fonksiyonlar bulunabilir. Köşegenleştirme ise –matris boyutunu N olarak düşünürsek – N^3 kadar işlem yükü demektir, ki bu da sistemin elektron sayısı kadardır. Böylesine büyük bir matris verilerini tutabilmek modern bilgisayarlarda bile imkânsızdır [47].

Köşegenleştirme ile en düşük enerjili Özdeğerleri bulmak için genelde Steepest Descent, Conjugate Gradient, Davidson, Lanczos, Carr-Parrinello gibi yöntemler kullanılmaktadır [47].

QE, Davidson veya CG (Conjugate Gradient) yöntemini kullanırken Siesta CG ya da Order-N yöntemini kullanır. Bu çalışmada QE için işlemleri daha hızlı yaptığından Davidson yöntemi tercih edilmiştir. Siesta içinse CG yöntemi kullanılmıştır. Order-N yönteminde çalışmak için k nokta sayısı bir adet olmalıdır. Fakat ileride göreceğimiz üzere, hesaplamalarda birden fazla k nokta sayısı gereklidir. Bu yüzden Order-N yöntemi ile çalışılmamaktadır.

Siesta'da, en düşük enerjili öz durumları bulma işlemi (köşegenleştirme) elektron durumlarının ortanormalize edilmesini gerektirmeden icra eder (CG). Ortogonalleşme ve AO için gerekli olan doğru normalizasyon enerjisinin minimize edilmesinin bir sonucu olarak ortaya çıkmaktadır [10]. Siesta ayrıca böl ve yönet yöntemi ile hesaplamaları daha da hızlı hale getirir.

Böl ve yönet yöntemi: Bu yöntemde Hamiltonyen matrisinin $O(N^3)$ ölçeklenmesini lineer ölçeklendirme sistemine indirger ve bunu tüm sistemin elektron yoğunluğunu alt bölümlere ayırmak için parçalı fonksiyonları kullanarak yapar. Her bir alt bölüm ayrı ayrı çözülür ve her bir sistemin elektron yoğunluğu bulunur. Tüm alt sistemlerden gelen yoğunlukların toplamı sistemin toplam elektron yoğunluğunu ve enerjisini bulmak için kullanılır [48].

QE yazılımında ise Davison köşegenleştirme yöntemi kullanılır. Bu yöntemde, tekrarlı olacak şekilde, tüm matrisi köşegenleştirmek yerine bunun alt uzayını köşegenleştirir ki bu durum da ilk birkaç en düşük (ya da en en yüksek) özdeğerleri verir. Böylece çok daha hızlı bir şekilde çözüm elde edilir ve tüm matrisi de oluşturmamız gerekmez [49].

Bahsedilen işlemleri yapabilmek adına öncelikle kullanılan nanoyapı örnekleme yazılımları için uygun bir işletim sistemi ve donanım ortamı belirlenmelidir. Daha sonra yazılımlar ilgili kütüphaneler ve işaretçiler yardımıyla derlenmeli, test örnekleri çalıştırılarak yazılımların doğru sonuçları üretip üretmediği kontrol edilmelidir. Eğer her şey beklenen sınırlar içinde ise hesaplamalara başlayabiliriz.

1.3.1. Donanım ve işletim sistemi

Kullanılan nanoyapı örnekleme yazılımları Linux ortamında çalıştığından Linux tabanlı bir işletim sistemi gereklidir. Bunun için ilk akla gelen işletim sistemi Ubuntu olacaktır. Ubuntu'nun artıları şunlardır;

- Ücretsizdir.
- Virüslere karşı oldukça dirençlidir.
- Açık kaynak kodludur.
- Linux tabanlı en çok kullanılanıdır ve buna bağlı olarak problemlere çözüm bulmak daha kolaydır.
- VMD, XrysDen, Pymol, Gnuplot, Grace, Vesta gibi nanoyapı hesaplama yazılımlarının sonuçlarını görselleştirmede kullanılan çeşitli ücretsiz yazılımları bizlere sunar.

İşletim sisteminin belirlenmesinden sonra donanım için çoklu işlemcili bir sisteme ihtiyacımız vardır. Bu sistem bize iyi işlemci ve bellek miktarı sunmalıdır. Bellek olarak 2400 MHz hızlı 32 GB'lık RAM seçilmiştir. İşlemciler ise 20 çekirdekli Intel işlemcidir (Intel(R) CPU E5-2630 v4 @ 2.20GHz X 2).

1.3.2. Yazılımların derlenmesi

Yazılımların çalışabilmesi için indirilen ilgili kodların derlenmesi gerekir. Derleme, ilgili kodun bilgisayarın anlayabileceği bir dile çevirme işlemidir. Bu sayede insanlar tarafından okunabilen ve anlaşılabilir kodlar makine diline dönüşür.

İlgili bilgisayar yazılımlarında oldukça fazla ve birbirinden ayrı kod bloğu bulunmaktadır. Bunların hepsini doğru bir şekilde derleyebilmek için make uygulaması kullanılır. Make uygulaması, yazılımların nasıl derleneceğini ve birbirleriyle nasıl bağlantılı olacağını belirler. Yazılımların yeniden derlenme sürecini otomatik hale getirmek, sadece değişen kısımların yeniden derlenmesini sağlamak suretiyle zamandan kazanmak ve işlemleri her zaman otomatik olarak doğru sırada yapmak için tasarlanmıştır. Bu uygulama Linux, Unix gibi ortamlarda çalışır [50].

Make, uygulanması gereken birçok işi tanımlayan makefile adında bir dosyaya ihtiyaç duyar. Yazılımların hangi derleyici ile derleneceği, derlenirken hangi seçeneklerin kullanılacağı ve hangi kütüphanelerin gerekli olduğu bu dosyada belirtilmesi gerekir. Böylece tek bir komutla (genelde make install) ilgili yazılımlar derlenebilir.

Make dosyasının yapısı hedef, önkoşul ve komut ifadelerinden oluşur.

Hedef (target): Genellikle bir program tarafından oluşturulan bir dosyanın ismidir. Çalıştırılabilirler ya da nesne dosyaları örnek olarak verilebilir.

Önkoşul (prerequisite): hedefi oluşturmak için giriş olarak kullanılan bir dosyadır. Bir hedef genellikle birden fazla dosyaya bağımlıdır.

Komut (command) : make'in gerçekleştirdiği bir eylemdir [51].

Siesta'da arc.make adındaki dosyayı yukarıda gösterildiği gibi hazırlamak yeterli olacaktır. Make install komutu ile derlenir. QE yazılımında ise ilgili dizin içerisinde ./configure komutunu kullanarak makefile dosyasının otomatik olarak hazırlanmasını sağlayabiliriz. Yazılımı derlemek için make all yazmak yeterli olacaktır.

Bu ifadelerin içeriği Tablo 1.1'de gösterilmiştir.

Tablo 1.1. Siesta ve QE için makefile içeriği.

Siesta	QE
FC=mpif90	MPIF90 = mpif90
FFLAGS= -w -mp -O3 -xHost -ip -prec-div -prec-sqrt	CC = cc
MKL =	F77 = ifort
/kütüphaneye_gidiş/compilers_and_libraries_2018.2.199/linux/mkl	FFLAGS = -w -mp -O3 -xHost -ip -prec-div -prec-sqrt
INTEL_LIBS =	SCALAPACK_LIBS = -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_openmpi_lp64
\$(MKL)/lib/intel64/libmkl_intel_lp64.a \	
\$(MKL)/lib/intel64/libmkl_sequential.a \	
\$(MKL)/lib/intel64/libmkl_core.a \	DFLAGS = -D_INTEL -D_FFTW -D_MPI -D_SCALAPACK
\$(MKL)/lib/intel64/libmkl_blacs_openmpi_lp64.a \	
\$(MKL)/lib/intel64/libmkl_scalapack_lp64.a	
LIBS = -Wl,--start-group \$(INTEL_LIBS) \	
-Wl,--end-group -lpthread -lm	

IEEE kayar nokta standardı: Bilgisayarlarda sıklıkla sayma işlemi için tam sayılar kullanılır. Birçok bilimsel hesaplamalar ise gerçek sayıları – yani nokta kesirli olan sayılar – kullanarak gerçekleştirilir. Bilgisayarlarda gerçek sayıları temsil edebilmek için, iki önemli soruyu sormamız gerekir. Birincisi gerçek sayıları kodlamak için kaç tane bit gerektiğine karar vermemiz gerektiğidir ve ikincisi ise bu bitlerle gerçek sayıları nasıl temsil edebileceğimizdir. IEEE (Institute of Electrical and Electronics Engineers) tarafından kurulan standartlar komitesi bu konuda girişimde bulunmuşlardır ve gerçek sayıları aşağıdaki gibi üç kısma ayırmayı uygun görmüşlerdir; S (Sign, işaret), E (Exp, üssel) ve F (Fraction, kesir) [52].

32 bit için (Single) : SEEEEEEEEEFFFFFFFF FFFFFFFF FFFFFFFF

64 bit için (Double) :SEEEEEEEEEEEEEFFFF FFFFFFFF FFFFFFFF FFFFFFFF FFFFFFFF FFFFFFFF FFFFFFFF

Böylece yukarıdaki gösterim IEEE standartı olarak bilinir.

Şimdi programları derlerken kullandığımız parametrelere bakalım. Bu parametreler flag olarak adlandırılır ve derleme işleminin nasıl olacağını belirlemede etkilidir.

Bildirim Parametreleri:

-w: Tüm hata bildirimlerini etkin hale getirir.

Performans Parametreleri:

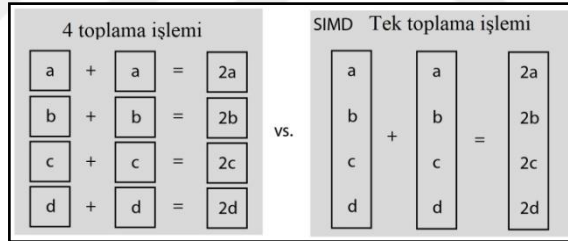
-O1: Hızlanma için iyileştirme sağlar.

-O2: sabit yayılma, kopya yayılma, ölü-kod elemesi, genel kayıt ayırma, genel işlem düzenlemesi ve tahmin kontrolü, döngü açma, optimize edilmiş kod seçimi, parçalı yedeklilik elemesi, değişken ad değiştirme, kuyruk özyineleme, peephole optimizasyonu, ölü bellek optimizasyonu gibi etkiler yaratır.

-O3: Döngü dönüşümleri ve önceden getirme gibi daha saldırgan optimizasyonlarla O2 optimizasyonunu beraber kullanır. En iyi hız değeri için optimizasyonu etkin hale getirir fakat döngü ve bellek erişim dönüşümleri meydana gelmedikçe yüksek performans garanti etmez.

-xHost: SIMD (tek işlem, çoklu veri) birim zamanda birden çok işlem tek bir veri akışı ile gerçekleşir. Modern x86 işlemciler birden fazla veriyi tek bir işlem ile işleyebilen vektör birimleri içermektedirler.

xHost ise bunlarda desteklenen vektörlerin en yüksek seviyeleri olanları kullanılabilir hale getirmeye yaramaktadır. Böylece en iyi donanım kullanım verimliliği sağlanmış olur.



Şekil 1.9. Normal ve SIMD toplama işlemi

-ip: IPO, tekrarlı hesaplamaları ve belleğin verimsiz kullanımını düşürmeyi yada yok etmeyi ve ayrıca döngüler gibi yinelemeli sıralamaları kolaylaştırmaya çalışır.

Hassasiyet Parametreleri:

-mp: Bu flag, sonuçları tam olarak doğru bulabilmek için en iyilemeyi (optimizasyon) sınırlar ve kayan noktalı işlemler IEEE standartlarıyla uyumlu hale gelir.

-prec-div: Kayan nokta bölme işlemi optimizasyonunu devre dışı bırakarak kayan nokta bölme sonucunun hassasiyetini artırır ve tam IEEE uyumlu bölme işlemi gerçekleşir.

-prec.sqrt: Karekök içeren işlemlerin hassasiyetini artırır. Tam sonuç elde edilir fakat çok azda olsa performans kaybı yaşanır.

Bu çalışmada derlemede kullanılan O3+ilave adındaki en iyi parametre topluluğu aşağıdaki gibidir.

-w, -mp, -O3, -xHost, -ip, -prec-div ve -prec-sqrt

1.3.3. MPI (Mesaj Geçirmeli Arayüz)

Tarihsel olarak baktığımızda, MPI, ilk olarak, 1991 yılındaki dağıtılmış bellek ortamı konulu bir çalışmada sunulmuştur. 1994 yılında ise ilk sürümü olan MPI1 ortaya çıkmıştır. Günümüzde ise 2008 yılında ortaya çıkan 3. Sürümünü (MPI3) kullanıyoruz. MPI, kullandığı programlama diline bağlı değildir. Yani biz MPI komutlarını, C, C++, Java, Fortran, Python vb. gibi programlama dilleri ile de kullanabiliriz [53].

MPI'nin ana amaçları kaynak kod taşınabilirliğini sağlamak ve çeşitli mimariler arasında etkin uyarlamayı mümkün kılmaktır. MPI kendi sahası dışında bilinçli olarak süreçlerin işlemcilerle ilk kez yüklenilmesi, yürütme esnasında süreçlerin olaya dâhil edilmesi, hata ayıklama, gibi konulara destek vermektedir [54].

MPI bir kütüphanedir. Bir MPI süreci, MPI fonksiyonları çağırarak diğer MPI süreçleri ile iletişime geçen bir C veya Fortran programından oluşur.

MPI verileri dağıtma, toplama, global toplamlar yapma vb. gibi işler için çok çeşitli fonksiyonlar sağlar. Bu tür fonksiyonlar, toplu işlemler yapıldığından dolayı “toplu iletişim” fonksiyonları olarak ifade edilirler [54]. QE ve Siesta programlarında genelde MPI_Barrier, MPI_Allreduce, MPI_Bcast ve MPI_Alltoall en çok zaman alan fonksiyonlardır.

MPI_Barrier: İletişimde olan tüm işlemcileri bu rutine ulaşıncaya kadar bekletir.

MPI_Bcast: Kapsam dâhilinde olan tüm işlemcilerle bir işlemcide barındırılan verileri gönderir.

MPI_Alltoall: İşlemcilerin hepsinden tümüne veriyi gönderir.

MPI_Allreduce: Tüm işlemcilerden verileri toplar ve elde edilen sonucu tüm işlemcilere gönderir.

1.3.4. Kütüphaneler

İncelenen bir sistemin toplam enerjisi bulmak için Hamiltonyen ifadesinin köşegenleştirilmesi gerektiğini biliyoruz. Köşegenleştirme işlemini verimli hale getirmek için belli kütüphanelerden yararlanmalıyız. Intel mpi derleyici için bunlar ScaLAPACK ve BLACS kütüphaneleridir [55-57].

ScaLAPACK paralel dağıtımli bellekli makineler için yüksek performanslı lineer cebir yordamlarının bir kütüphanesidir. Bu kütüphane, yoğun ve bağlı doğrusal sistemleri, en küçük kareler problemlerini, özdeğer problemlerini ve tek değer problemlerini çözer. Köşegenleştirme işlemi bu kütüphane ile sağlanır.

ScaLAPACK ile ulaşılmak istenilenler aşağıdaki gibidir;

- Verim (programlı mümkün olduğu kadar hızlı çalıştırmak)
- Ölçeklenebilirlik (problemin boyutu ve çekirdek sayıları arttıkça denge sağlama)
- Güvenilirlik
- Taşınabilirlik (tüm önemli paralel makinelerde çalışabilme)
- Esneklik (kullanıcılar çok iyi tasarlanmış parçalarından yeni yordamlar oluşturabilir)
- Kullanım kolaylığı

Scalapack'in haberleşme katmanı olarak BLACS kullanılır. Matris-matris çarpımı ve matris-vektör çarpımında kullanılır.

1.3.5. Verileri yorumlamak için parametreler

Amdahl Yasası verilen bir uygulama için teorik olarak en fazla ne kadar paralel performans kazancı elde edilebileceğini tanımlayan ve büyük ihtimalle en çok bilinen ve başvurulan kanunlardan bir tanesidir [58]. Bu yasa 1967 yılında Gene Amdahl tarafından paralel hesaplamanın tartışıldığı bir konferansta paralel hesaplama karşı delil olarak sunulmuştur [3,59]. Performans kazancı (Pk) aşağıdaki formülle hesaplanır.

$$P_k = \frac{1}{(1-P) + \frac{P}{N}} \quad (1.27)$$

Burada P, işin paralelleştirilebilme yüzdesi ve N ise çekirdek sayısıdır. Örneğin bir işin %60'ının paralelleştirilebildiğini ve iki çekirdek kullandığımızı varsayalım. O zaman hızdaki artış

$$P_k = \frac{1}{(1-0,60) + \frac{0,60}{2}} = 1,43 \quad (1.28)$$

olur. Görüldüğü üzere işin %40'ı seri ve %60'ı ise paralel olarak çalıştırılmaktadır. %60 olan paralel kısım iki çekirdek tarafından kullanıldığı için, her bir çekirdeğe %30'luk iş düşmektedir. Dolayısıyla bu değeri seri yüzdesi ile toplarsak, her bir çekirdek başına %70'lik iş düşer. Bu da her bir çekirdek için 100 birimlik bir işi 70 birimlikmiş gibi yapmaya benzemektedir. $100/70 = 1,43$ oranında hızlanma olacaktır.

Amdahl yasasından yola çıkarak hızlanma ve paralel verimlilik ifadelerine ulaşılabilir. Bunlar, elde ettiğimiz verileri yorumlamada etkilidir. Hızlanma, seri çalışma süresinin paralel çalışma süresine oranıdır ve aşağıdaki eşitlik ile ifade edilir.

$$S_N = \frac{T_S}{T_N} \quad (1.29)$$

S_N , N çekirdek sayısındaki paralel hızlanma, T_S , seri çalışma süresi ve T_N ise N çekirdek sayısındaki paralel çalışma süresidir. Eğer hesaplamalarda T_S ifadesini MPI kullanarak bir çekirdek ile ifade etmek istersek o zaman hızlanma ifadesi bağıl hızlanma olarak adlandırılır ve ilgili eşitlik aşağıdaki gibi olur.

$$\tilde{S}_N = \frac{T_1}{T_N} \quad (1.30)$$

Bağıl hızlanmanın normal hızlanmadan farkı T_S ve T_1 ifadeleridir. T_1 ifadesinde tek bir işlemci MPI ortamında çalıştırılırken T_S ifadesi ise seri olarak çalıştırılmaktadır. MPI ortamının çalışır hale getirilmesi - tek bir işlemci olsa bile - seri duruma göre daha çok çalışma zamanı gerektirebilir ve böylece $T_1 \geq T_N$ olacağı açıktır. Dolayısıyla $\tilde{S}_N \geq S_N$ şeklinde bir eşitliğe ulaşabiliriz. Diğer taraftan, eğer S_N ifadesi N değerine

eşitse bu doğrusal hızlanma, N değerinden büyükse süper doğrusal hızlanma ve 1 değerinden küçükse de paralel yavaşlama özelliği göstermektedir.

Hızlanmanın üst sınırını Denklem (1.27) ile belirleyebiliriz. Verilen örnekte işlemin %60'ı paralelleştirilebiliyordu. Böylesine bir sistem için ne kadar çekirdek kullanılırsa kullanılsın elde edilebilecek en iyi hızlanma değeri tek çekirdekli durumdan yaklaşık 2,5 kat daha hızlı olur. Çünkü N ifadesi sonsuz alınırsa elde edilen sonuç bu olur.

Bir diğer ifade paralel verimlilik ise hızlanmanın çekirdek sayısına oranıdır ve aşağıdaki eşitlikle ifade edilir.

$$E_N = \frac{S_N}{N} \quad (1.31)$$

Bu ifade genellikle 0 ila 1 arasında değerler alabilir. Benzer bir şekilde bağlı verimlilik ise aşağıdaki ifade ile verilir ve $\tilde{E}_N \geq E_N$ şeklinde bir eşitliği burada da görmek mümkündür.

$$\tilde{E}_N = \frac{\tilde{S}_N}{N} \quad (1.32)$$

2. YÖNTEM

QE [9] ve Siesta [10] programları DFT'ye dayalı olarak çalışmaktadır [22-23]. Değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim için GGA yöntemi kullanıldı [60]. Kesilim enerjileri QE için 35 Ry ve Siesta için 250 Ry olarak belirlendi. Her bir yazılım için k noktalar sayısı MP (Monkhorst –Pack) yöntemi [61] ile belirlenmiş olup 3x3x1 olarak alındı. QE yazılımı için Ultrasoft ve Siesta yazılımı için Norm-conserving PP kullanıldı [62-63]. Geometrik iyileştirmeler BFGS (Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno) ve CG yöntemleri ile gerçekleştirildi [64-65]. DFT yakın mesafeli etkileşimleri (kovalent ve iyonik bağ gibi) doğru bir şekilde tanımlayabiliyorken uzak mesafeli etkileşimleri - vdW (van der Waals) - doğru bir şekilde tanımlayamamaktadır. Çünkü standart yarı-bölgesel xc fonksiyonları (LDA, GGA, meta-GGA vb.) sınırlı bir bölgeyi içermektedir ve vdW gibi uzun menzilli etkileri tanımlamada başarısızdır. Bu durum sistemin çok-parçacıklı olmasından ya da Schrödinger denkleminde kaynaklı değildir. Daha çok DFT'de yaklaşımlar kullanmamızın bir sonucudur. Dolayısıyla vdW etkisi için sistemin enerjisine bir “düzeltme” terimi ilave edilmelidir. Bu çalışmada, her iki yazılım için vdW etkisi dâhil edildi ve bu Grimme-D2 ile gerçekleştirildi [66]. Ayrıca sistemlerin geometrilerini göstermek adına VESTA yazılımından yararlanıldı [67].

Yazılımlar (QE v-5.2.0, v-6.3.0 ve Siesta v-3.2, v-4.1.3) Linux tabanlı sistemlerde çalışmaktadır. Bu yüzden işletim sistemi olarak 64 Bit Ubuntu 14.04 kullanılmıştır. Yazılımları derlemek ve karşılaştırma yapabilmek adına Intel Fortran Compiler'ın 2018.2.199 ve 2013.5.192 sürümleri göz önüne alındı. MPI için, IntelMPI haricinde, OpenMPI v-3.0.1 (2018 yılına ait) ve v-2.1.0 (2013 yılına ait) sürümleri kullanıldı. Burada bu sürümlerin seçilmesinin nedeni sadece sürüm farklılığını görmek içindir.

3. BULGULAR VE TARTIŞMA

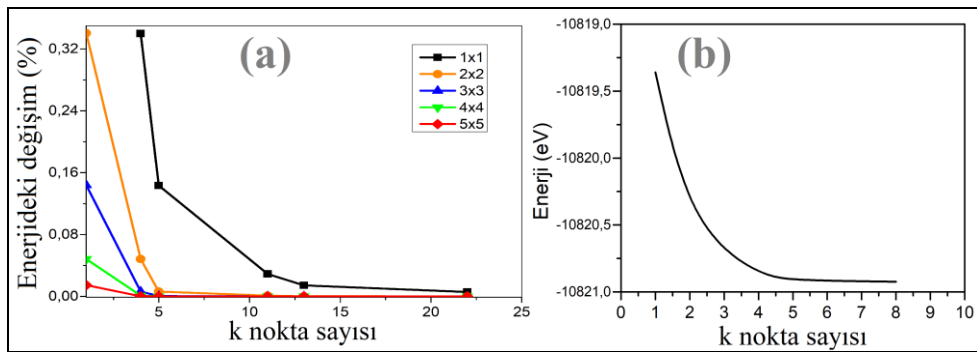
Bu bölümde yazılımların parametrelerinin etkisi ve elde edilen sonuçların yorumlanması ele alınmıştır.

3.1. En İyi Fiziksel Parametrelerin Belirlenmesi

Bir sistemin uygun K nokta sayıları ve Kesilim enerjisini bulmak için toplam enerjinin yakınsama durumunu inceleyeceğiz.

3.1.1. K noktalarının Etkisi

K noktalar sayısının değerleri arttıkça sistemin toplam enerjisi belli bir değere doğru yakınsamaktadır. Burada dikkat edilecek en önemli şey birim hücrenin hacmi arttıkça toplam enerji değerine yakınsama daha az sayıda k noktaları ile mümkün olabilmektedir. Şekil 3.1-a'da gösterilen 1x1 ifadesi en küçük hücre yani birim hücreye karşılık gelir. Diğerlerinde ise gösterilen rakam kadar birim hücrenin boyutları artmaktadır. Boyut arttıkça hacim ve dolayısıyla gerekli k nokta sayısı değişmektedir.



Şekil 3.1. k noktalar sayısı. (a) Mavi Fosforen'in farklı birim hücrelere göre enerjideki değişim (b) Bu çalışma için Enerjinin k nokta sayılarına göre değişimi.

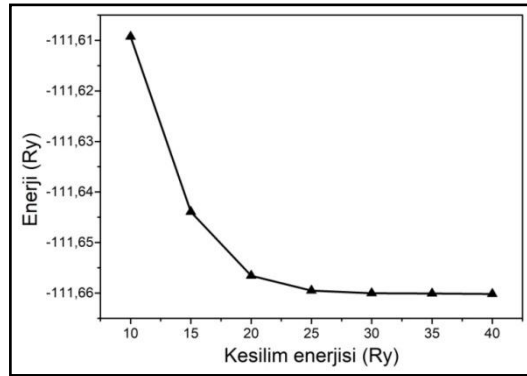
K noktalar sayısı özellikle külçe (bulk) olan iletkenlerde önemlidir. Periyodik olan birim hücreler birbirlerine doğru yaklaştıkça komşu hücreler arasındaki etkileşim önem kazanıyor ve böylece elektronlar her k noktasında farklı davranış sergilemeye

başlıyorlar. Sadece molekül ya da bu çalışmada olduğu gibi molekül-iki boyutlu yapı sistemlerinde daha az k noktaları yeterli olacaktır. Şekiller bize bu çalışmada her iki yazılım için beş adet k noktanın yeterli olduğunu göstermektedir.

3.1.2. Kesilim Enerjisinin (E_{cut}) Etkisi

P,C,N,O ve H atomlarından oluşan yapı için E_{cut} aşağıdaki gibi verilmiştir. Şekil 3.2’de görüldüğü üzere kesilim enerjisinin değeri arttıkça belli bir enerji değerine doğru bir yakınsama olmaktadır. 35 Ry değerinden sonra enerjideki değişim çok az miktarda olduğundan sistem üzerindeki etkisi de oldukça az olacaktır. Bu yüzden Kesilim enerjisini daha da arttırarak programın çalışma süresini uzatmanın anlamı yoktur. Hem sonuçları doğru bir şekilde elde edebileceğimiz hem de en uygun çalışma süresine tekabül eden 35 Ry değerini tüm hesaplamalar için kullanabiliriz.

Bu kesilim enerjisi sadece atomların cinsine (ve yapay potansiyel türüne) bağlı olarak değişmektedir ve en çok temel set gerektiren atom tarafından belirlenir. Yani kesilim enerjisini atom sayısının ya da birim hücre hacminin değişmesi ile ilişkili değildir.



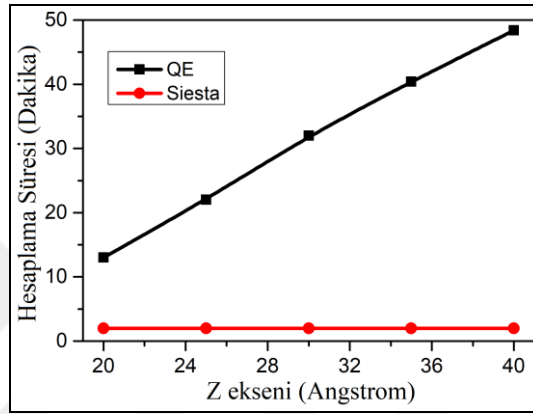
Şekil 3.2. Quantum Espresso için kesilim Enerjisi.

3.1.3. Boşluğun (Vacuum) etkisi

QE ve Siesta yazılımlarında periyodik sınır şartı uygulamaktadır. Bir molekülün sadece yüzey ile etkileşimini incelemek istiyorsak diğer komşu hücredeki molekülle etkileşimini ortadan kaldırmamız gerekiyor. Bunu ise birim hücreyi yeterince büyük yapmakla elde edebiliriz. Birim hücreyi büyütme demek aslında boşluk yaratmak anlamına gelir.

Düzlem dalga yöntemi ile çalışan programlarda (Örn. QE), birim hücrenin her hacminde hesaplama yapılmaktadır ve buna boşluk da dâhildir. Atom cinsi ve sayısı değişmese bile birim hücrenin hacmi arttırılırsa hesaplama süresi artacaktır.

Atom tabanlı baz kullanan yazılımlarda (Örn. Siesta) ise durum farklıdır. Hesaplamalarda sadece atomların yakınında gerçekleşir, boşlukta hesaplama yapılmaz. Bu yüzden boşluk ne kadar fazla olursa olsun hesaplamaların süresini değiştirmeyecektir.



Şekil 3.3. Boşluğun etkisi

Yukarıdaki şekilde 8 çekirdek ile yapılan BP-Alanine hesaplarında z yönündeki boşluğun hesaplama süresi ile karşılaştırılması gösterilmiştir. QE yazılımında hesaplama süresi boşluk arttıkça artmaktadır fakat Siesta yazılımında önemli bir değişim gözükmemektedir. QE yazılımında eğer hesaplamaları kısa zamanda yapmak istiyorsak boşluğu olabildiğince azaltmamız gerekir.

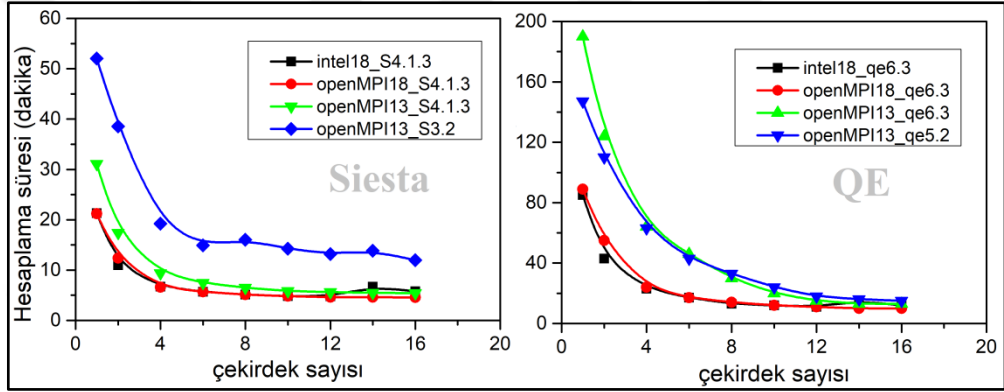
Fakat boşluğu azaltmak, periyodik sınır şartından dolayı birbirine komşu olan hücreler arasındaki etkileşimi arttırmaktadır. Hesaplamalar yaparken boşluğu olabildiğince hücreler arası etkileşim olma durumu ortaya çıkıncaya kadar azaltmamız gerekir.

Bu çalışmada x,y ve z eksenini için sırasıyla 13,7, 13,4 ve 20 Å (10^{-10} m) almak yeterli olmaktadır.

3.2. En İyi Derleme Parametrelerinin ve Çekirdek Sayılarının Belirlenmesi

Şekil 3.4’de BP-Alanine sisteminin QE ve Siesta programları ile çalıştırılması sonucunda elde edilen çalışma sürelerinin çekirdek sayılarına göre karşılaştırılması verilmiştir. Şekilde görüldüğü üzere, hem yazılımların hem de derleyicilerin sürümleri hesaplama sürelerini etkilemektedir. Yeni sürümlerin hesaplama süresinde olumlu bir etkisi vardır.

Özellikle bu etki QE yazılımında daha açık bir şekilde görülmektedir. Diğer yandan derleyicilerin IntelMPI ya da OpenMPI olmasının etkisi oldukça azdır. IntelMPI ile derlenen yazılımlar daha iyi bir performans sunmaktadır çünkü sahip olduğumuz donanım Intel tabanlıdır ve donanıma göre optimize edilmiş bir derleyicidir.

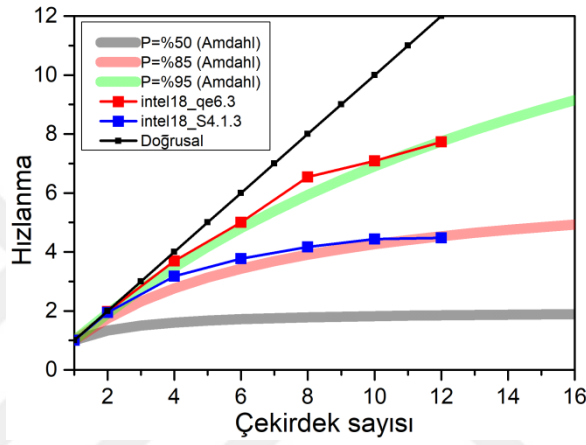


Şekil 3.4. Hesaplama sürelerinin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması

Yazılımların sürümleri de hesaplama süresini etkilemektedir. Siesta yazılımının eski sürümü ile yeni sürümü arasında ciddi bir fark bulunmaktadır. Yazılımdan elde edilen sonuçları dikkatli bir şekilde incelediğimizde toplam enerjiyi bulmak için gerekli olan döngü sayısının eski sürümde daha fazla olduğu ortaya çıkmıştır. Fakat burada elde edilen sonuç sadece hızı etkilemekte olup tüm sürümler için toplam enerji değerinde farklılık görülmemektedir.

Son olarak yazılımların çalışma sürelerine baktığımızda 16 çekirdekten sonra çalışma hızına bir katkısı olmamaktadır. Bunun en büyük sebeplerinden biri çalıştırılan çekirdek sayıları arttıkça çekirdekler arası iletişim daha karmaşık hale gelmekte olup işlem hızını etkilemesidir.

Şekilde 3.5’de yazılımların sonuçları ile Amdahl yasasınıninkiler verilmiştir. QE yazılımının Siestaya göre daha iyi bir şekilde paralelleştirilebildiği açık bir şekilde görülmektedir. Bunun en büyük sebepleri kullandıkları matris köşegenleştirme yöntemleri ve kullandıkları temel setlerdir. QE yazılımında çekirdek sayısını fazla kullanmak hızlanmayı arttırabilirken, Siesta’da ise özellikle 12 çekirdekten sonra hızlanma neredeyse sabit bir hale gelmektedir. Daha fazla çekirdek sayısı almanın bir anlamı yoktur. Ayrıca elde edilen sonuçlar doğrusal hızlanmanın altında gözükmektedir. Bu beklenen bir durumdur.



Şekil 3.5. Yazılımlardan elde edilen sonuçların Amdahl yasasından elde edilenlerle karşılaştırılması

$$T_N = W_S + \frac{W - W_S}{N} \quad (3.1)$$

$$T_S = W \quad (3.2)$$

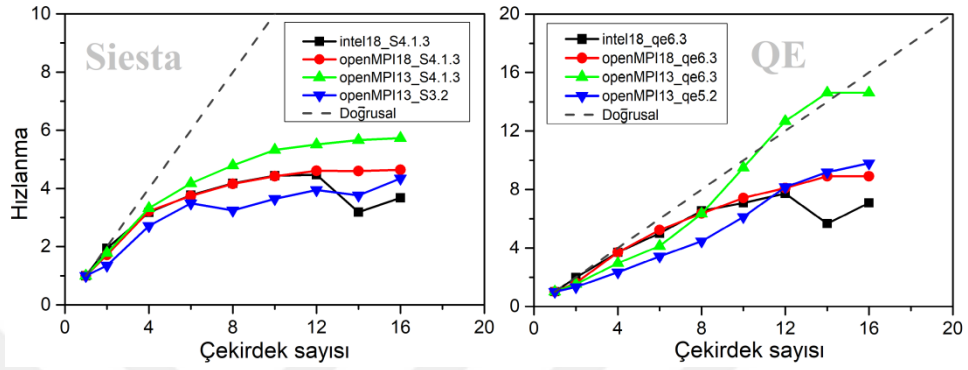
$$S_N = \frac{T_S}{T_N} = \frac{W}{W_S + \frac{W - W_S}{N}} \leq \frac{W}{W_S} \quad (3.3)$$

Denklem (3.3), Denklem (1.27)’ye oldukça benzemektedir. Burada, W , işin tamamını oluşturur. $W - W_S$ ifadesi paralel kısmın ve W_S ifadesi ise seri kısmın iş miktarıdır. T_N , işleyiş süresidir.

QE yazılımında işin yaklaşık %95’i paralelleştirilebilirken Siestada ise bu değer %85’tir. Bu sonuçlardan yola çıkarak, ele aldığımız problem Denklem (3.3)’e göre, işlemci sayısını ne kadar artırırsak artıralım hızlanmanın QE yazılımında en fazla 20

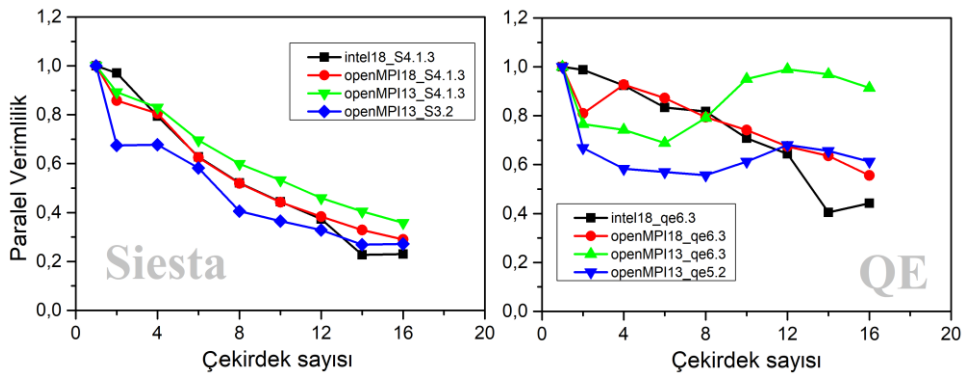
kat (%5 seri, $W_S=0,05W \Rightarrow S_P \leq 20$) ve Siesta'da ise yaklaşık 6,7 kat (%15 seri, $W_S=0,15W \Rightarrow S_P \leq 6,7$) olacağını görebiliriz.

Aşağıdaki şekilde ise yazılımların hızlanma (speedUp) ile ilgili verileri verilmektedir.



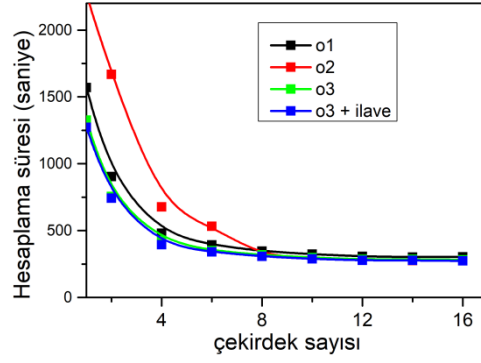
Şekil 3.6. Hızlanma değerlerinin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması

Bu şekilde derleyicilerin yeni sürümlerinin genelde daha iyi bir performans sergilediği gözükmektedir. İstisna olarak bahsedebileceğimiz şey QE yazılımı için openMPI13_qe5.2 ile gösterilen durumdur. Burada doğrusal davranış 12 ve 14 çekirdek ile yapılan hesaplamalarda aşılmıştır ve süper doğrusal bir davranış meydana gelmektedir. Öte yandan hem yazılımların hem de derleyicinin yeni sürümleri ile yapılan hesaplamaların küçük çekirdek sayılarında (Siesta için 4, QE için 8'den küçük) daha etkili oldukları görülmektedir.

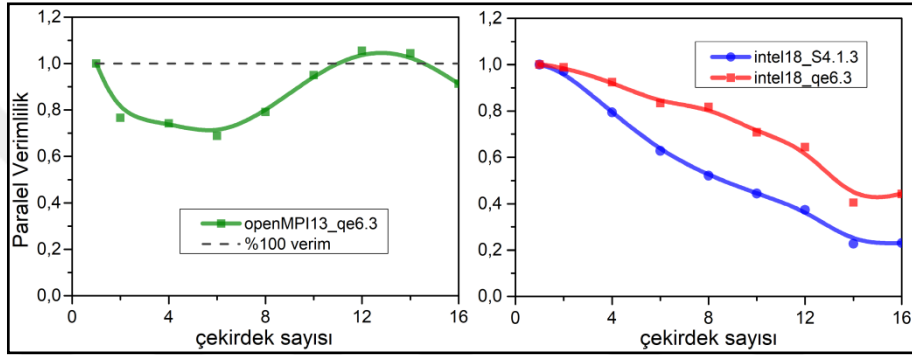


Şekil 3.7. Paralel verimliliklerin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması

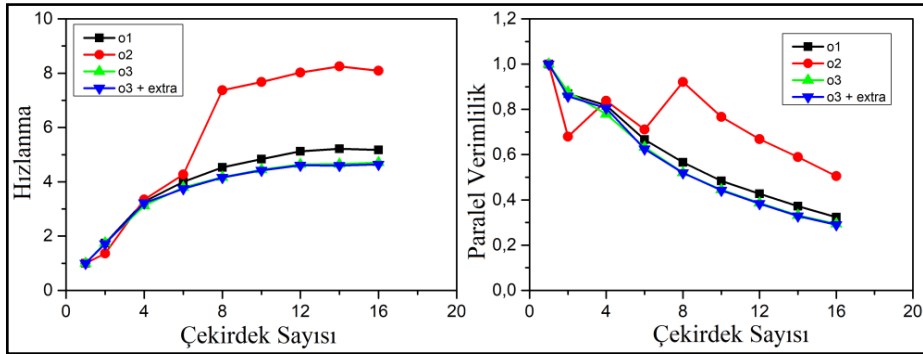
Şekil 3.7'de Fortran'ın 2013 yılındaki sürümü özellikle QE yazılımında anormal bir davranış sergilemektedir. Bu durum QE'nun yeni sürümünde daha açık bir şekilde görülmektedir.



Şekil 3.8. Siesta programı için hesaplama süresinin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması



Şekil 3.9. Siesta ve QE yazılımları için paralel verimliliklerin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması



Şekil 3.10. Siesta programı için hızlanma ve paralel verimliliklerin çekirdek sayıları ile karşılaştırılması

QE yazılımında işaretçilerin görülebilir bir etkisi olmadığı için sadece Siesta ile ilgili sonuçlar verilmiştir. Elde edilen veriler o3+ilave ile derlenen programın en iyi performans sonucunu verdiği görülmektedir.

3.3. Yazılımlarda Elde Edilen Fiziksel Veriler ve Yorumlanması

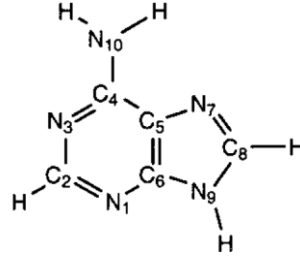
Hesaplamalara başlamadan önce özellikle Siesta yazılımında baz fonksiyonlarından hangisini seçmenin daha uygun olabileceğini belirleyelim.

Tablo 3.1’de Adenine molekülünün bağ uzunluklarının deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılması verilmiştir. Sonuçlarda görüldüğü üzere DZP’nin deneysel sonuçlara en yakını olduğu görülmektedir ve bu yüzden tüm hesaplamalarda DZP tercih edilmiştir.

Tablo 3.1. Adenine molekülünün bağ uzunluklarının karşılaştırılması (Å cinsinden).

Bağlar	Siesta (SZ)	Siesta (DZ)	Siesta (DZP)	Quantum Espresso	Deneysel [68]
N ₁ C ₂	1,459	1,370	1,354	1,344	1,331
C ₂ N ₃	1,460	1,372	1,354	1,348	1,339
N ₃ C ₄	1,452	1,379	1,358	1,351	1,351
C ₄ N ₁₀	1,423	1,365	1,370	1,356	1,335
C ₄ C ₅	1,482	1,428	1,426	1,414	1,406
C ₅ C ₆	1,473	1,422	1,416	1,405	1,383
C ₆ N ₁	1,453	1,369	1,351	1,344	1,344
C ₅ N ₇	1,485	1,407	1,392	1,389	1,388
N ₇ C ₈	1,430	1,347	1,330	1,320	1,311
C ₈ N ₉	1,473	1,400	1,390	1,383	1,373
N ₉ C ₆	1,452	1,392	1,387	1,382	1,374

Bu çalışmada yapmak istediğimiz moleküller ile BP etkileşim enerjilerini bulmaktır. Moleküller ile BP birbirine yeterince yakınsa aralarında bir etkileşim olacaktır. Bu, etkileşim enerjisi ile belirlenir. Yani etkileşim ne kadar büyük olursa bu enerji de o denli büyük olur. Etkileşim enerjileri negatif enerjilidir. Bunun anlamı şudur; Eğer biz molekülü BP’den ayırmak istiyorsak sisteme enerji göndermemiz gerekir ki bu da en az etkileşim enerjisi kadar olmalıdır.



Şekil 3.11. Adenine molekülünün yapısı

Etkileşim enerjileri hesaplamalarında molekül ile iki boyutlu malzeme birbirine yakın konumlara getirilir ve yazılım çalıştırılır. Yazılım, bağlı olduğu algoritmaya göre (genelde BFGS ya da CG) en uygun enerji ve atomik pozisyonları bulur. Bizde en uygun durumdaki atomik pozisyonları kullanarak etkileşim enerjilerini hesaplarız.

Etkileşim enerjisi aşağıdaki eşitlik ile bulunmaktadır.

$$E_{(\text{Etkileşim})} = E_{(\text{molekül}+\text{BP})} - E_{(\text{molekül})} - E_{(\text{BP})} \quad (3.4)$$

Burada $E_{(\text{Etkileşim})}$ etkileşim enerjisini vermektedir. $E_{(\text{molekül}+\text{BP})}$ molekül ile fosforenin, $E_{(\text{molekül})}$ sadece molekülün ve $E_{(\text{BP})}$ ise sadece BP'nin enerjisidir. Etkileşim enerjileri genelde eV (elektronvolt) cinsinden belirtilir ($1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19}$ Joule'dur).

Birçok kimyasal sistemde atomlar ve moleküller arasındaki vdW etkisi önemli bir rol oynamaktadır. Bu etki elektrostatik itme ve çekme arasında dengeyi sağlar ve özellikle DNA'da, proteinlerin ve kristal paketlerinin oluşumunda, moleküllerin yüzeyler ile etkileşiminde büyük öneme sahiptir [66].

Tablo 3.2. eV cinsinden etkileşim enerjileri. Parantez içindekiler QE ile elde edilmiştir.

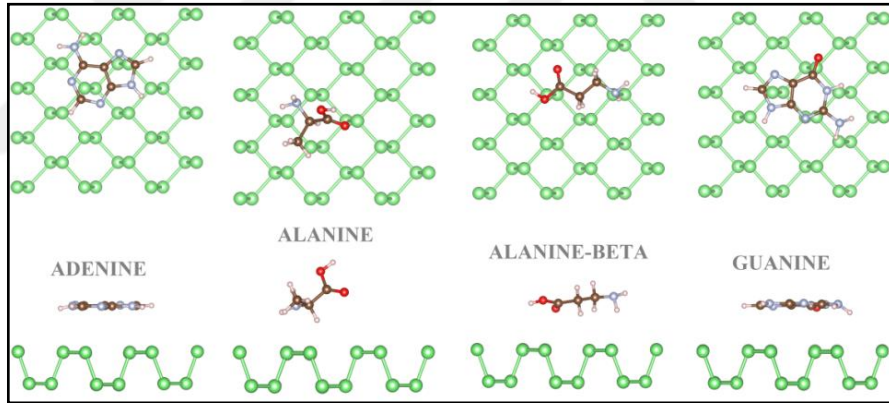
Moleküller	Bu çalışma (vdW etkisiz)	Bu çalışma (vdW etkili)	Kaynak [40]
Alanine	-0,18	-0,49 (-0,33)	-
Beta-Alanine	-0,25	-0,61 (-0,38)	-
Guanine	-0,40	-1,03 (-0,65)	-0,97
Adenine	-0,27	-0,86 (-0,51)	-0,89

Bu çalışmada, molekül ile yüzey arasında vdW etkileşiminin olabilme durumu incelenmiştir. İlgili sonuçları Tablo 3.2’de de görmek mümkündür. Bu sonuçlara göre vdW etkisi, etkileşim enerjisinin büyük bir kısmını oluşturduğu görülmektedir ve mutlaka hesaplamalara dâhil edilmelidir.

Etkileşim enerjilerinin mertebesine baktığımızda yüksek enerjili bir bağlanmanın olmadığı görülmektedir.

Parantez içerisinde bulunan QE yazılımından elde edilen enerjiler Siesta yazılımından elde edilenlerden farklıdır. Bunun sebeplerinden biri kullanılan bazların farklı olmasıdır. Bazlar için kullanılan parametrelerin değiştirilmesi enerji değerlerini de etkilemektedir. Zaten böylesine farklılıkların olması beklenmektedir.

Moleküllerin ve yüzeyin en düşük (uygun) enerjideki durumları Şekil 3.12’de gösterilmiştir.



Şekil 3.12. Moleküllerin BP üzerindeki en uygun pozisyonlarının üstten ve yandan gösterimi.

Şekilde yeşil, mavi, kırmızı, kahverengi ve pembe ile gösterilenler sırasıyla fosfor, azot, oksijen, karbon ve hidrojen atomlarını temsil etmektedir.

Şekilde, moleküller ile yüzey arasındaki mesafe 3 – 4 Å mertebesindedir. Bu molekül/yüzey etkileşimleri için beklenen bir değerdir ve daha önceden yapılmış kuramsal çalışmalarla uyum içerisinde [69]. Ayrıca bu mertebedeki mesafelerde etkileşimin kovalent ya da iyonik bağlanmada olduğu gibi kuvvetli değil, uzak mesafeli yani zayıf olması gerekir. Elde edilen enerji değerleri de bunu göstermektedir.

4. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında BP'nin Alanine, Adenine ve Guanine molekülleri ile etkileşimi QE ve Siesta yazılımları ile incelendi. Elde edilen etkileşim enerjileri önceki çalışmalarla uyumludur. BP'nin Alanine molekülü ile etkileşimi baz alınarak fiziksel parametrelerin, derleyicinin ve yazılımların sürümlerinin, parametrelerin ve çekirdek sayılarının hesaplama hızına etkisi araştırıldı ve en iyi senaryo ortaya çıkarılmaya çalışıldı. En uygun kesilim enerjisi ve k noktaları sayısı 35 Ry ve 5 olarak bulundu. Boşluk ortamı arttıkça QE yazılımında çalışma süresinin de arttığı gözlemlendi. Diğer yandan hızlanmanın ve paralel verimliliğin QE yazılımında daha iyi olduğu ve dolayısıyla Siesta'ya göre çekirdeklerden daha iyi yararlanılabileceği ortaya çıktı. Ayrıca, her iki yazılım için, yazılımların ve derleyicinin en yeni sürümlerinde daha iyi performans sağladığı görüldü. O3 eniyileme parametresinin diğerlerine (O1 ve O2) göre daha etkili olduğu ortaya çıkmıştır.

Bu sonuçlara göre, bir nanoyapı örnekleme yazılımı derlerken, hem derleyicinin hem de yazılımın sürümünün en yeni olmasına dikkat etmeli ve ayrıca O3 eniyileme parametresini kullanmalıyız. Yazılımlar çalışır hale getirildikten sonra sisteme uygun kesilim enerjisi ve k nokta sayılarını belirlemeliyiz. İşlemci sayılarını akıllı bir şekilde kullanarak birim zaman yapılan işi artırmalıyız.

KAYNAKLAR

- [1] Lee J. G., *Computational Materials Science An Introduction*, 1st Ed., Crc Press, Florida, 2012.
- [2] Sutter H., The Free Lunch is Over: A Fundamental Turn Toward Concurrency İn Software, *Dr. Dobb's Journal*, 2005, **30**, 202-210.
- [3] Ergün U., Sayar A., Fonksiyonel Programlama Dilleri İle Paralel Programlama, *Niğde Üniversitesi Mühendislik Bilimleri Dergisi*, 2014, **3**(2), 1-17.
- [4] Gropp W., Lusk E., Thakur R., *Advanced Features of the Message-Passing Interface*, 1st Ed., MIT Press, London, 1999.
- [5] Kresse G., Furthmüller J., Efficient Iterative Schemes for Ab İnitio Total-Energy Calculations Using A Plane-Wave Basis Set, *Physical Review B*, 1996, **54** (16), 11169.
- [6] Segall M. D., Lindan P. J., Probert M. A., Pickard C. J., Hasnip P. J., Clark, S. J., Payne M. C. First-Principles Simulation: Ideas, Illustrations and the CASTEP Code, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, **14** (11), 2717.
- [7] Schwarz K., Blaha P., Solid State Calculations Using WIEN2k, *Computational Materials Science*, 2003, **28**(2), 259-273.
- [8] Dovesi R., Erba A., Orlando R., Zicovich-Wilson C. M., Civalieri B., Maschio L., Kirtman, B., Quantum-Mechanical Condensed Matter Simulations with CRYSTAL, *Computational Molecular Science*, 2018, **8**(4), 1360.
- [9] Giannozzi, P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Dal Corso, A. QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, **21**(39), 395502.
- [10] Soler J. M., Artacho E., Gale J. D., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D. The SIESTA Method for Ab Initio Order-N Materials Simulation, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, **14** (11), 2745.
- [11] Gulans A., Kontur S., Meisenbichler C., Nabok D., Pavone P., Rigamonti S., Draxl C. Exciting: A Full-Potential All-Electron Package Implementing Density-Functional Theory and Many-Body Perturbation Theory, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2014, **26** (36), 363202.

- [12] Gonze X., Beuken J. M., Caracas R., Detraux F., Fuchs M., Rignanese G. M.,Torrent M., First-Principles Computation Of Material Properties: The ABINIT Software Project, *Computational Materials Science*, 2002, **25** (3), 478-492.
- [13] Griffiths D. J., *Introduction to Electrodynamics*, 3rd Ed., Prentice Hall, London, 1999.
- [14] Feynman R.P, *The Character of Physical Law*, 1st Ed., M.I.T. Press, Cambridge, 1967.
- [15] Feynman R.P, *Six Easy Pieces*, 4th Ed., Basic Books, California, 2011.
- [16] Penrose R., *The Emperor's New Mind: Concerning Computers, Minds, and the Laws of Physics*, 1st Ed., Oxford University Press, Oxford, 1989.
- [17] David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd Ed., Prentice Hall, New Jersey, 1995.
- [18] Thijsen J., *Computational Physics*, 2nd Ed., Cambridge University Press, New York, 2012.
- [19] Manninen P., Advanced Computational Chemistry, [Http://Www.Chem.Helsinki.Fi/~Manninen/Lecture_Notes.Pdf](http://www.chem.helsinki.fi/~manninen/lecture_notes.pdf) (Ziyaret Tarihi: 13 Ocak 2019).
- [20] Koch W. H., *A Chemist's Guide To Density Functional Theory*, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Weinheim, 2015.
- [21] Beisher A., *Concepts of Modern Physics*, 6th Ed., Mcgraw-Hill, New York, 2003.
- [22] Hohenberg P., Kohn W., Inhomogeneous Electron Gas, *Physical Review*, 1964, **136** (3B), B864.
- [23] Kohn W., Sham L. J., Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Physical Review*, 1965, **140** (4A), A1133.
- [24] Aras M., Zno-Tabanlı Nanoyapıların İlk Prensiplere Dayalı Yöntemlerle Modellenmesi Ve İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Gebze Teknik Üniversitesi, Mühendislik Ve Fen Bilimleri Enstitüsü, Kocaeli, 2014, 364058.
- [25] Spaeth J. M., Overhof H., *Point Defects in Semiconductors and Insulators*, 1st Ed., Springer, Berlin, 2013.
- [26] Cottenier S., *Handbook Of Solid State Chemistry*, 1st Ed., Wiley-Vch, Weinheim, 2004.
- [27] Autschbach J., Orbitals: Some Fiction and Some Facts, *Journal of Chemical*

Education, 2012, **89** (8), 1032-1040.

- [28] Junquera J., Paz Ó., Sánchez-Portal D., Artacho E., Numerical Atomic Orbitals for Linear-Scaling Calculations, *Physical Review B*, 2001, **64** (23), 235111.
- [29] Salmankurt B., KMgF₃ Kristalinin Yapısal, Elastik, Elektronik ve Titreşim Özelliklerinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 2014, 377296.
- [30] Geim A. K., Konstantin S. N., The Rise of Graphene, *Nature Materials*, 2007, **6** (3), 183-191.
- [31] Dresselhaus M. S., Araujo P. T., Perspectives on the 2010 Nobel Prize in Physics for Graphene. *ACS Nano*, 2010, **4** (11), 6297-6302.
- [32] Balandin A. A., Ghosh S., Bao W., Calizo I., Teweldebrhan D., Miao F., Lau C. N., Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene, *Nano Letters*, 2008 **8** (3), 902-907.
- [33] Vogt P., De Padova, P., Quaresima C., Avila, J., Frantzeskakis E., Asensio M. C., Le Lay G., Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon, *Physical Review Letters*, 2012, **108** (15), 155501.
- [34] Dávila M. E., Xian L., Cahangirov S., Rubio A., Le Lay G., Germanene: A Novel Two-Dimensional Germanium Allotrope Akin to Graphene and Silicene, *New Journal of Physics*, 2014, **16** (9), 095002.
- [35] Xu M., Liang T., Shi M., Chen H., Graphene-Like Two-Dimensional Materials, *Chemical Reviews*, 2013, **113** (5), 3766-3798.
- [36] Zhu F. F., Chen W. J., Xu Y., Gao C. L., Guan D. D., Liu C. H., Jia J. F., Epitaxial Growth of Two-Dimensional Stanene, *Nature Materials*, 2015, **14** (10), 1020-1025.
- [37] Liu H., Neal A. T., Zhu Z., Luo Z., Xu X., Tománek D., Ye P. D., Phosphorene: An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility, *ACS Nano*, 2014, **8** (4), 4033-4041.
- [38] Hussain T., Vovusha, H., Kaewmaraya T., Amornkitbamrung V., Ahuja R., Adsorption Characteristics Of DNA Nucleobases, Aromatic Amino Acids and Heterocyclic Molecules on Silicene and Germanene Monolayers, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2018, **255**, 2713-2720.
- [39] Aierken Y., Çakır D., Sevik C., Peeters F. M., Thermal Properties of Black and Blue Phosphorenes from A First-Principles Quasiharmonic Approach, *Physical Review B*, 2015, **92** (8), 081408.
- [40] Cortés-Arriagada D., Phosphorene as a Template Material for Physisorption of DNA/RNA Nucleobases and Resembling of Base Pairs: A Cluster DFT

Study and Comparisons with Graphene, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2018, **122** (9), 4870-4880.

- [41] Ding Y., Wang Y., Structural, Electronic, and Magnetic Properties of Adatom Adsorptions on Black and Blue Phosphorene: A First-Principles Study, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, **119** (19), 10610-10622.
- [42] Jing Y., Tang, Q., He P., Zhou Z., Shen P., Small Molecules Make Big Differences: Molecular Doping Effects on Electronic and Optical Properties of Phosphorene, *Nanotechnology*, 2015, **26** (9), 095201.
- [43] Cai Y., Ke Q., Zhang G., Zhang Y. W., Energetics, Charge Transfer, and Magnetism of Small Molecules Physisorbed on Phosphorene, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, **119** (6), 3102-3110.
- [44] Zhang R., Li, B., Yang J., A First-Principles Study on Electron Donor and Acceptor Molecules Adsorbed on Phosphorene, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, **119**(5), 2871-2878.
- [45] Hirata Y., Kubota S., Watanabe S., Momose T., Kawaguchi, K., Millimeter-Wave Spectroscopy of A-Alanine, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 2008, **251**(1-2), 314-318.
- [46] Blancquaert L., Everaert I., Derave W., Beta-Alanine Supplementation, Muscle Carnosine and Exercise Performance, *Current Opinion in Clinical Nutrition & Metabolic Care*, 2015, **18** (1), 63-70.
- [47] Saad Y., Chelikowsky J. R., Shontz S. M., Numerical Methods for Electronic Structure Calculations of Materials, *SIAM Review*, 2010, **52** (1), 3-54.
- [48] Cankurtaran B. O., Gale J. D., Ford M. J., First Principles Calculations Using Density Matrix Divide-And-Conquer within the SIESTA Methodology, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2008, **20** (29), 294208.
- [49] Goings J., Davidson's Method, <https://Joshuagoings.Com/2013/08/23>, (Ziyaret Tarihi: 16 Ocak 2019).
- [50] Demirten M., Makefile Kullanımı, <http://Www.Belgeler.Org/Howto/Makefile-Nasil-Kullanimi.Html>, (Ziyaret Tarihi: 16 Ocak 2019).
- [51] R. M. Stallman, R. Mcgrath, An Introduction to Makefiles, [Ftp://Ftp.Gnu.Org/Old-Gnu/Manuals/Make-3.79.1/Html_Chapter/Make_2.Html](ftp://Ftp.Gnu.Org/Old-Gnu/Manuals/Make-3.79.1/Html_Chapter/Make_2.Html), (Ziyaret Tarihi: 16 Ocak 2019).
- [52] Cowlshaw M., Densely Packed Decimal Encoding, *IEE Proceedings-Computers and Digital Techniques*, 2002, **149** (3), 102-104.

- [53] Gropp W., Lusk, E., Doss N., Skjellum, A., A High-Performance, Portable Implementation of the MPI Message Passing Interface Standard, *Parallel Computing*, 1996, **22**(6), 789-828.
- [54] Karasulu B., Paralel Hesaplama Tekniğinin Monte Carlo Simulasyonunda Uygulanması, Yüksek Lisans Tezi, Maltepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul, 2006, 221939.
- [55] J. J. Dongarra, J. Du Croz, I. S. Duff, S. Hammarling, A Set of Level 3 Basic Linear Algebra Subprograms, *Acm Transactions On Mathematical Software*, 1990, **16**, 1-17.
- [56] Dongarra J. J., Hammarling J. Du Croz S., R. J. Hanson, An Extended Set of FORTRAN Basic Linear Algebra Subroutines, *Acm Transactions On Mathematical Software*, 1988, **14**, 1-17.
- [57] Lawson C. L., Hanson R. J., Kincaid D., Krogh F. T., Basic Linear Algebra Subprograms For Fortran Usage, *Acm Transactions on Mathematical Software*, 1979, **5**, 308-323.
- [58] Amdahl G. M., Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large Scale Computing Capabilities, *IEEE Solid-State Circuits Society Newsletter*, 1967, **12**(3), 19-20.
- [59] Gustafson J. L., Reevaluating Amdahl's Law, *Communications of the ACM*, 1988, **31**(5), 532-533.
- [60] Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M., Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 1996, **77** (18), 3865.
- [61] Monkhorst H. J., Pack, J. D., Special Points for Brillouin-Zone Integrations, *Physical Review B*, 1976, **13** (12), 5188.
- [62] Vanderbilt D., Soft Self-Consistent Pseudopotentials in A Generalized Eigenvalue Formalism, *Physical Review B*, 1990, **41** (11), 7892.
- [63] Hamann D. R., Schlüter M., Chiang C., Norm-Conserving Pseudopotentials, *Physical Review Letters*, 1979, **43** (20), 1494.
- [64] Nash S. G., Nocedal, J., A Numerical Study Of The Limited Memory BFGS Method and the Truncated-Newton Method for Large Scale Optimization, *SIAM Journal On Optimization*, 1991, **1**(3), 358-372.
- [65] Millam J. M., Scuseria G. E., Linear Scaling Conjugate Gradient Density Matrix Search As An Alternative to Diagonalization for First Principles Electronic Structure Calculations, *The Journal of Chemical Physics*, 1997, **106** (13), 5569-5577.
- [66] Grimme S., Semiempirical GGA-Type Density Functional Constructed with A Long-Range Dispersion Correction, *Journal of Computational*

Chemistry, 2006, **27** (15), 1787-1799.

- [67] Momma K., Izumi F., VESTA 3 For Three-Dimensional Visualization of Crystal, Volumetric and Morphology Data, *Journal of Applied Crystallography*, 2011, **44** (6), 1272-1276.
- [68] Preuss M., Schmidt W. G., Seino K., Furthmüller J., Bechstedt F., Ground-And Excited-State Properties of DNA Base Molecules from Plane-Wave Calculations using Ultrasoft Pseudopotentials, *Journal of Computational Chemistry*, 2004, **25** (1), 112-122.
- [69] Gürel H. H., Salmankurt B., Binding Mechanisms of DNA/RNA Nucleobases Adsorbed on Graphene under Charging: First-Principles Van Der Waals Study, *Materials Research Express*, 2017, **4** (6), 065401.





EKLER

Ek –A

QE yazılımı derlendikten sonra bin dizini içerisindeki pw.x komutu ile program aşağıda gösterildiği gibi çalıştırılır.

```
mpirun -np N pw.x -inp scf.in |tee out.dat
```

Ya da

```
mpirun -np N pw.x <scf.in> out.dat
```

N, kullanılmak istenen çekirdek sayısıdır. scf.in, program parametrelerinin olduğu dosyadır ve içeriği aşağıdaki gibidir. out.dat ise yazılımın çalıştırılması sonucu elde edilen çıktıları barındırır.

```
&control
  calculation='relax'
  restart_mode='from_scratch',
  prefix='a',
  tstress = .true.
  tprnfor = .true.
  pseudo_dir = '/potansiyel_dizini/',
  outdir='out',
    etot_conv_thr = 1.0E-4,
    forc_conv_thr = 1.0D-3,
  wf_collect=.true.,
  verbosity='low',
  nstep=250,
/
&system
vdw_corr='dft-d',
ibrav=0,celldm(1)=1.889726124565062,
nat= 61, ntyp=5,
ecutwfc =35.0,
ecutrho=280,
occupations='smearing',
smearing='mp',
degauss=0.01,
/
&electrons
conv_thr = 1.0d-8,
mixing_beta = 0.5,
electron_maxstep=70,
mixing_mode='local-TF',
/
&ions
ion_dynamics='bfgs'
/
&cell
/
CELL_PARAMETERS
13.7474775314    0.0000000000    0.0000000000
0.0000000000    13.2354373932    0.0000000000
0.0000000000    0.0000000000    19.0000000000
```

ATOMIC_SPECIES

P 30.974 P.pbe-n-van.UPF
 C 12.011 C.pbe-van_ak.UPF
 N 14.007 N.pbe-van_ak.UPF
 H 1.0079 H.pbe-van_ak.UPF
 O 15.999 O.pbe-van_ak.UPF

ATOMIC_POSITIONS {crystal}

P	-0.000299450	0.002212105	0.410950555
P	-0.000510364	0.252366259	0.410375856
P	-0.000259887	0.502244899	0.410036645
P	-0.000507083	0.752095795	0.410581660
P	0.335249648	0.002261307	0.407364002
P	0.335518950	0.252321188	0.407369464
P	0.336581916	0.501915816	0.405627340
P	0.336352452	0.752507396	0.407977184
P	0.665850201	0.002096850	0.406827989
P	0.665851975	0.252171809	0.406647318
P	0.665052021	0.502350685	0.405548399
P	0.665052480	0.751608247	0.407374319
P	0.227197709	0.127357853	0.409085444
P	0.227752445	0.377676465	0.408619299
P	0.228597757	0.626931579	0.409542531
P	0.227322697	0.877034433	0.409367628
P	0.557785679	0.127099059	0.405899939
P	0.557802975	0.376957470	0.404539528
P	0.556559941	0.626819367	0.405144715
P	0.557539081	0.877244138	0.406453140
P	0.891188271	0.127202960	0.410053163
P	0.891180837	0.377489573	0.409515242
P	0.891181570	0.626987143	0.409536198
P	0.891181973	0.877223934	0.410150007
P	0.058198297	0.002123389	0.299818077
P	0.058126623	0.252222936	0.299258222
P	0.058691169	0.502522013	0.299072143
P	0.058473781	0.752091626	0.299598131
P	0.391281498	0.002005020	0.295436415
P	0.390998056	0.251895934	0.295290986
P	0.391305060	0.502310903	0.293572927
P	0.390690461	0.752546351	0.295508906
P	0.726649082	0.002114970	0.296501515
P	0.726983209	0.251978685	0.296455312
P	0.726939840	0.502295711	0.295586485
P	0.726371710	0.752208140	0.297077194
P	0.166143679	0.127198187	0.298807519
P	0.166318763	0.377102596	0.298442663
P	0.166797736	0.627453255	0.299324260
P	0.166298793	0.877209281	0.299085075
P	0.499587148	0.127071056	0.294648459
P	0.499444770	0.376825821	0.293472066

P	0.499372066	0.627820460	0.293640194
P	0.499622861	0.877015034	0.295081232
P	0.835074045	0.126945574	0.298171649
P	0.835000144	0.377171419	0.297689819
P	0.834846328	0.627510860	0.297749878
P	0.834687778	0.877012395	0.298357140
C	0.400765048	0.548735764	0.580994474
C	0.498366230	0.497618859	0.586258020
C	0.583606691	0.570436817	0.595031197
N	0.674519108	0.512351949	0.599996138
H	0.574478565	0.613706569	0.644094547
H	0.581730028	0.626274656	0.551531613
H	0.497136609	0.442002672	0.629344555
H	0.507090387	0.452748755	0.537474959
H	0.689869539	0.479216213	0.552440750
H	0.731351003	0.559936699	0.610489003
H	0.265749390	0.518433405	0.578849649
O	0.326291355	0.479867551	0.585032506
O	0.386030311	0.638989946	0.573000080
K_POINTS {automatic}			
3 3 1 0 0 0			

İlgili parametrelerin ne anlama geldiği https://www.quantum-espresso.org/Doc/INPUT_PW.html linkinden ulaşılabilir. İlgili yapay potansiyellere ise <https://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials> linkinden ulaşılabilir. Burada potansiyeller pseudo_dir ile gösterilen dizinde bulunmalıdır.

Ek –B

Siesta yazılımı derlendikten sonra Obj dizini içerisindeki siesta komutu ile program QE yazılımına benzer şekilde aşağıda gösterildiği gibi çalıştırılır.

```
mpirun -np N siesta < INPUT.fdf |tee out.dat
```

Ya da

```
mpirun -np N pw.x < INPUT.fdf > out.dat
```

N, kullanılmak istenen çekirdek sayısıdır. INPUT.fdf, program parametrelerinin olduğu dosyadır ve içeriği aşağıdaki gibidir. out.dat ise yazılımın çalıştırılması sonucu elde edilen çıktıları barındırır.

```
SystemName   Alanine
SystemLabel  Alanine

%block ChemicalSpeciesLabel
1 15 P-gga
2 6 C-gga
3 7 N-gga
4 1 H-gga
5 8 O-gga
%endblock ChemicalSpeciesLabel

xc.functional   GGA
xc.authors      PBE

MeshCutoff      300 Ry
SolutionMethod  diagon
MaxSCFIterations 150

OccupationFunction  MP
ElectronicTemperature 300 K

UseSaveData      F
DM.Tolerance      1.d-5
DM.NumberPulay    6
DM.MixingWeight   0.2
#DM.InitSpinAF    .true.

PAO.BasisSize    DZP
PAO.EnergyShift   50 meV
PAO.SplitNorm     0.15

MD.VariableCell   F
MD.NumCGsteps     100
MD.TypeOfRun      CG

WriteMullikenPop  1
WriteForces       T
WriteCoorStep     T
```

```

Diag.ParallelOverK    T
Diag.DivideandConquer T

%block kgrid_Monkhorst_Pack
5 0 0.
0 5 0.
0 0 1.
%endblock kgrid_Monkhorst_Pack

MM.UnitsDistance Ang # what this program prints out DO NOT CHANGE
MM.UnitsEnergy eV # what this program prints out DO NOT CHANGE
MM.Grimme.S6 0.75 # Grimme-paper for PBE (correct for your functional)
MM.Grimme.D 20. # Grimme-paper (correct for your functional)
%block MM.Potentials
1 1 Grimme 81.26 3.410 # P, 10.1002/jcc.20495
1 2 Grimme 38.39 3.157 # P / C
1 3 Grimme 32.19 3.102 # P / N
1 5 Grimme 24.28 3.047 # P / O
1 4 Grimme 10.86 2.706 # P / H
2 2 Grimme 18.14 2.904 # C, 10.1002/jcc.20495
2 3 Grimme 15.21 2.849 # C / N
2 5 Grimme 11.47 2.794 # C / O
2 4 Grimme 5.13 2.453 # C / H
3 3 Grimme 12.75 2.794 # N, 10.1002/jcc.20495
3 5 Grimme 9.62 2.739 # N / O
3 4 Grimme 4.30 2.398 # N / H
5 5 Grimme 7.26 2.684 # O, 10.1002/jcc.20495
5 4 Grimme 3.24 2.343 # O / H
4 4 Grimme 1.45 2.002 # H, 10.1002/jcc.20495
%endblock MM.Potentials

NumberOfAtoms 61
Numberofspecies 5

LatticeConstant 1.00 Ang
%block LatticeVectors
13.7120456696 0.0000000000 0.0000000000
0.0000000000 13.4038200378 0.0000000000
0.0000000000 0.0000000000 20.0000000000
%endblock LatticeVectors

AtomicCoordinatesFormat Fractional
%block AtomicCoordinatesAndAtomicSpecies
0.00028951 0.00306855 0.41066188 1 1 P-gga
0.00025221 0.25312780 0.41037760 1 2 P-gga
0.00022706 0.50308768 0.41055621 1 3 P-gga
0.00010093 0.75304834 0.41086489 1 4 P-gga

```

0.33541029	0.00319657	0.40844787	1	5	P-gga
0.33554224	0.25304524	0.40842564	1	6	P-gga
0.33708014	0.50222059	0.40692046	1	7	P-gga
0.33695335	0.75349496	0.40960170	1	8	P-gga
0.66680878	0.00291679	0.40808268	1	9	P-gga
0.66680456	0.25308019	0.40756168	1	10	P-gga
0.66577070	0.50303641	0.40747032	1	11	P-gga
0.66575595	0.75250406	0.40855319	1	12	P-gga
0.22503750	0.12814823	0.40943567	1	13	P-gga
0.22575316	0.37843327	0.40934408	1	14	P-gga
0.22719217	0.62758424	0.41099323	1	15	P-gga
0.22549492	0.87782808	0.40992445	1	16	P-gga
0.55661015	0.12799472	0.40745375	1	17	P-gga
0.55644360	0.37756187	0.40591691	1	18	P-gga
0.55511679	0.62761124	0.40719632	1	19	P-gga
0.55616221	0.87820400	0.40781615	1	20	P-gga
0.88974877	0.12808881	0.40996566	1	21	P-gga
0.88971856	0.37813737	0.40988421	1	22	P-gga
0.88962851	0.62795668	0.41008070	1	23	P-gga
0.88963517	0.87812138	0.41024646	1	24	P-gga
0.05668683	0.00279685	0.30294384	1	25	P-gga
0.05647953	0.25309918	0.30264103	1	26	P-gga
0.05747092	0.50365659	0.30307942	1	27	P-gga
0.05734921	0.75275800	0.30334688	1	28	P-gga
0.38983968	0.00297139	0.30017241	1	29	P-gga
0.38961828	0.25263262	0.30000125	1	30	P-gga
0.38976676	0.50315244	0.29854092	1	31	P-gga
0.38934613	0.75316872	0.30068989	1	32	P-gga
0.72469863	0.00294672	0.30081406	1	33	P-gga
0.72508955	0.25284828	0.30042311	1	34	P-gga
0.72487306	0.50314966	0.30063540	1	35	P-gga
0.72419245	0.75298848	0.30134827	1	36	P-gga
0.16672281	0.12802373	0.30222579	1	37	P-gga
0.16689750	0.37795436	0.30236006	1	38	P-gga
0.16806442	0.62831213	0.30380128	1	39	P-gga
0.16721712	0.87800750	0.30273615	1	40	P-gga
0.50040043	0.12789876	0.29966235	1	41	P-gga
0.50010346	0.37766576	0.29830537	1	42	P-gga
0.50020167	0.62845059	0.29908106	1	43	P-gga
0.50020174	0.87786703	0.29992019	1	44	P-gga
0.83536698	0.12776033	0.30168110	1	45	P-gga
0.83524464	0.37813803	0.30166518	1	46	P-gga
0.83492729	0.62834265	0.30190753	1	47	P-gga
0.83481240	0.87773220	0.30206996	1	48	P-gga
0.40289394	0.54363274	0.56760218	2	49	C-gga
0.50051260	0.49304343	0.57812839	2	50	C-gga
0.58491912	0.56672791	0.58738540	2	51	C-gga
0.67716599	0.51138402	0.59110024	3	52	N-gga
0.57443596	0.60826148	0.63527737	4	53	H-gga

0.58061970	0.62419708	0.54649640	4	54	H-gga
0.49617515	0.43933249	0.62058869	4	55	H-gga
0.51312208	0.44651290	0.53228911	4	56	H-gga
0.69349806	0.48153682	0.54476025	4	57	H-gga
0.73322362	0.55996906	0.60158186	4	58	H-gga
0.26748543	0.51734830	0.56754042	4	59	H-gga
0.32683158	0.47874141	0.57788502	5	60	O-gga
0.39011901	0.63064109	0.55030178	5	61	O-gga

%endblock AtomicCoordinatesAndAtomicSpecies

İlgili parametrelerin ne anlama geldiği <https://launchpadlibrarian.net/379220760/siesta.pdf> linkinden ulaşılabilir. İlgili yapay potansiyellere ise <http://nninc.cnf.cornell.edu/> linkinden ulaşılabilir. Buradaki potansiyeller INPUT.fdf dosyasının olduğu dizinde bulunmalıdır.



KİŞİSEL YAYIN VE ESERLER

- [1] **Salmankurt B.**, Duman S., First-Principles Study of Structural, Mechanical, Lattice Dynamical and Thermal Properties of Nodal-Line Semimetals $ZrXY$ ($X= Si, Ge; Y= S, Se$), *Philosophical Magazine*, 2017, **97**(3), 175-186.
- [2] Gürel H. H., **Salmankurt B.**, Binding Mechanisms of DNA/RNA Nucleobases Adsorbed on Graphene under Charging: First-Principles Van Der Waals Study, *Materials Research Express*, 2017, **4**(6), 065401.
- [3] **Salmankurt B.**, Duman S., Investigation of the Structural, Mechanical, Dynamical and Thermal Properties of $CsCaF_3$ And $CsCdF_3$, *Materials Research Express*, 2016, **3**(4), 045903.
- [4] Yalcin B. G., **Salmankurt B.**, Duman S., Investigation of Structural, Mechanical, Electronic, Optical, and Dynamical Properties of Cubic $BaLiF_3$, $BaLiH_3$, And $SrLiH_3$, *Materials Research Express*, 2016, **3**(3), 036301.
- [5] Bagci S., Yalcin B. G., Aliabad H. R., Duman S., **Salmankurt B.**, Structural, Electronic, Optical, Vibrational and Transport Properties of $CuBX_2$ ($X= S, Se, Te$) Chalcopyrites. *RSC Advances*, 2016, **6**(64), 59527-59540.
- [6] Gürel H. H., **Salmankurt B.**, Graphene Based Biosensors, *AIP Conference Proceedings*, 2016 **1**(1722), 080004.
- [7] Kılıçarslan A., Bal E., Dinç M., **Salmankurt B.**, Duman S., First-Principles Studies of the Atomic, Elastic and Vibrational Properties of $BaNbO_3$. *AIP Conference Proceedings*, 2016, **1**(1722), 2200121-2200124.
- [8] Bal E., Dinç M., Kılıçarslan A., **Salmankurt B.**, Duman S. Structural, Elastic and Vibrational Properties Of $ScGa_3$ *AIP Conference Proceedings*, 2016, **1**(1722), 2200241-2200244.
- [9] Gürel H. H., **Salmankurt B.**, Biological Application of Graphene Oxide, *AIP Conference Proceedings*, 2016, **1**(1722), 2200101-2200104.
- [10] Gürel H. H., **Salmankurt B.**, Interaction Mechanism of Biomolecules on Vacancy Defected 2D Materials, *AIP Conference Proceedings*, 2017, **1**(1815), 0500051-0500054.
- [11] **Salmankurt B.**, Gürel H. H., Interaction of Amino Acids with Adatoms (Ti, C And O) Decorated Graphene via Effect of Charging, *AIP Conference*

Proceedings, 2017, **1**(1815), 0500121-0500124.

- [12] Feyzioğlu K. F., **Salmankurt B.**, Duman S., Theoretical Study of The Structural, Electronic, Dynamical and Thermal Properties of LaSn_3 and LaPb_3 , *AIP Conference Proceedings*, 2017, **1**(1815), 1200031-1200034.
- [13] Kılıçarslan A., **Salmankurt B.**, Duman S., Theoretical Investigation of the Structural, Electronic, Dynamical and Thermal Properties of YSn_3 And YPb_3 , *AIP Conference Proceedings*, 2017, **1**(1815), 1200061-1200064.
- [14] **Salmankurt B.**, Gürel H.H, Modifiying of Gas Adsorption on Phosphorene, *AIP Conference Proceedings*, 2018, **1**(1815), 1200071-1200074.
- [15] **Salmankurt B.**, Gürel H.H, Effects of Electric Field on the Properties of 2D Topological Insulators, *AIP Conference Proceedings*, 2018, **1**(1935), 1500031-1500034.
- [16] **Salmankurt B.**, Gürel H.H, Computational Aspects of Nanostructures: PW vs AO Calculations, *AIP Conference Proceedings*, 2019, **1**(2075), 0200011-0200014

ÖZGEÇMİŞ

1989 yılında Kocaeli’nde doğdu. İlk, Orta ve Lise eğitimini İzmit’te aldı. 2008 yılında Ahi Evran Üniversitesi (Kırşehir) Fizik Bölümü’nü kazandı. 2012 yılında Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü’nde başladığı Yüksek Lisans eğitimini 2014 yılında bitirdi. 2015 yılında Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü’nde Doktora eğitimine, aynı yıl Kocaeli Üniversitesi Bilişim Sistemleri Mühendisliği Bölümü’nde ise Yüksek Lisans eğitimine başladı. Ayrıca 2017 yılından itibaren Kocaeli Üniversitesi Bilişim Sistemleri Mühendisliği Bölümü’nde Araştırma Görevlisi olarak görev almaktadır.

