

Temel Bilişim Yazılımları
2020-2021 Güz Dönemi
Python Ödevi

Soru: Structures.zip isimli zip dosyasında verilen xyz uzantılı dosyalar farklı kimyasal yapılara aittir.

Öncelikle bu zip dosyasında verilen xyz uzantılı dosyaları bir klasöre çıkartınız.

Yazacağınız bir python programı ile;

Bu dosyaların bulunduğu klasörde xyz uzantısına göre arama yaparak xyz dosyalarının isimlerini bir listeye ekleyiniz.

Bu listede isimleri bulunan xyz dosyalarında okuma yaparak her bir xyz dosyasından

- Atom sayısı
- Enerji değerleri
- Cell parametreleri

bilgilerini elde ediniz ve birer listeye ekleyiniz.

- **Fonksiyon 1:** Bu bilgileri kullanarak cell hacmini hesaplayan bir fonksiyon yazınız.
- **Fonksiyon 2:** Fonksiyon argümanı olarak ismi verilen yapının (xyz dosyasının) koordinat merkezini hesaplayan bir fonksiyon yazınız.
- **Fonksiyon 3:** Fonksiyon argümanı olarak ismi verilen iki yapının (xyz dosyasının) koordinat merkezlerinin birbirine uzaklıklarını hesaplayan bir fonksiyon yazınız.

Fonksiyon 1:

Cell hacmini hesaplamak için;

- Cell parametreleri ile 3x3lük bir matrisi doldurun,
- Bu matrisin determinantını alın (numpy kullanılabilir),
- Son olarak elde ettiğiniz sonucun mutlak değerini alın.

Fonksiyon 2:

Koordinat merkezini bulmak için;

- Yapıda bulunan tüm atomların x, y ve z koordinat değerlerini üç ayrı listeye ekleyiniz,
- Her listenin içindeki değerleri toplayınız ve yapının atom sayısına bölünüz.
- x, y ve z için bulunan ortalama değerler koordinat merkezidir.
 - Örnek:

▪ O	1.3	2.5	0.5
▪ H	2.5	1.2	3.2
- $x, y, z = (1.3+2.5)/2, (2.5+1.2)/2, (0.5+3.2)/2$ şeklindeki iki atomlu bir yapı için koordinat merkezi şu şekilde hesaplanır.
- Fonksiyon prototipi:
 - `def merkezBul(yapi1):`
 - ...

Fonksiyon 3:

- Koordinat merkezini hesaplayan fonksiyonu kullanarak iki yapı için de koordinat merkezini bulunuz.
- Bu merkezler arasındaki uzaklığı hesaplayınız.
- Fonksiyon prototipi:

- def merkezlerArasiUzaklik(yapi1,yapi2):

 merkez1 = merkezBul(yapi1) #Fonksiyon2 kullaniliyor

 merkez2 = merkezBul(yapi2) #Fonksiyon2 kullaniliyor

 uzaklikHesapla(merkez1, merkez2)

 # iki nokta arası uzaklığı hesaplamak için bir fonksiyon daha yazabilir veya direk bu fonksiyon içinde de hesaplayabilirsiniz.

Sonuç olarak;

Enerji değerlerine göre en düşükten en yükseğe olacak şekilde sıralanmış olan yapılar hakkında aşağıdaki şekilde bir raporu ekrana yazdırınız.

Yapi adi	Atom sayisi	Enerji	Cell Hacmi
4fuMC_Rhombo_58	52	-203.80325	485.87881
b3n2Tri_134	50	-12.99533	466.80725

Not: Kodların olabildiğince okunabilir ve test edilebilir şekilde yazılması beklenmektedir.