Modulbezeichnung:	**Numerische Simulationsmethoden in den WW (WW1-M3/M4/M5M10/M11-MWT/NT-SIM)** (Atomistic Simulation)	**5 ECTS**
Modulverantwortliche/r:	Erik Bitzek	
Lehrende:	Erik Bitzek	

Startsemester: SS 2021	Dauer: 1 Semester	Turnus: jährlich (SS)
Präsenzzeit: 60 Std.	Eigenstudium: 90 Std.	Sprache: Deutsch und Englisch

Lehrveranstaltungen:

Numerische Methoden in den Werkstoffwissenschaften - Atomistische Methoden (SS 2021, Vorlesung mit Übung, 4 SWS, Erik Bitzek et al.)

Inhalt:

Numerische Methoden in den Werkstoffwissenschaften, V+Ü, 2+2 SWS, 2+3 ECTS

The aim of the course is to build the theoretical basis required to perform and analyze cutting-edge atomistic simulations in materials science, and to provide the students with a "computational toolbox" for the most common tasks in atomistic modeling. The focus of this course lies on direct hands-on teaching. The students will work on little projects related to current research topics. This will enable the students to independently perform simulations using classical molecular dynamics (MD) codes like IMD and QuantumEspresso for DFT calculations. Topics include:

- General theory of atomistic simulations
- Advanced methods for the generation of atomistic samples
- MD integration algorithms for different thermodynamic ensembles (NVE,NVT,NPT)
- Energy minimization algorithms and structure optimization
- Introduction to Density Functional Theory
- Determination of defect properties
- Atomic interaction potentials, including EAM
- Advanced analysis and visualization methods for atomistic samples
- Monte Carlo and kinetic Monte Carlo methods
- Modeling thermally activated events: transition state theory, nudged elastic band calculations, hyperdynamic

Lernziele und Kompetenzen:

Fachkompetenz Evaluieren (Beurteilen) Die Studierenden

- vertiefen ihr Wissen über die vielfältigen strukturellen Aufbauten der Werkstoffe und können diese beurteilen
- vertiefen das Verständnis über die Zusammenhänge zwischen der chemischen Zusammensetzung, der Struktur und den Eigenschaften von Werkstoffen
- wenden und beurteilen Simulationsmethoden und können diese klassifizieren
- vertiefen die erlernten Inhalte durch Übungen

Lern- bzw. Methodenkompetenz Neue Methodenkompetenzen, die erworben werden können:

- numerische Simulationstechniken

Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:

Das Modul ist im Kontext der folgenden Studienfächer/Vertiefungsrichtungen verwendbar:

[1] **Nanotechnologie (Master of Science)**
(Po-Vers. 2020w | TechFak | Nanotechnologie (Master of Science) | Gesamtkonto | Kernfächer | Allgemeine Werkstoffeigenschaften | Atomistische Simulation)

[2] **Nanotechnologie (Master of Science)**
(Po-Vers. 2020w | TechFak | Nanotechnologie (Master of Science) | Gesamtkonto | 1. und 2. Naturwissenschaftlich-technisches Wahlmodul | Atomistische Simulation)

Dieses Modul ist daneben auch in den Studienfächern "Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)" verwendbar.

Studien-/Prüfungsleistungen:

Atomistische Simulation (Prüfungsnummer: 62061)
Prüfungsleistung, mündliche Prüfung, Dauer (in Minuten): 15
Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%
weitere Erläuterungen:
Prüfungssprache nach Wahl der Studierenden
Prüfungssprache: Deutsch oder Englisch

Erstablegung: SS 2021, 1. Wdh.: WS 2021/2022
1. Prüfer: Erik Bitzek