

---

**Modulbezeichnung:** Werkstoffsimulation für NT (M7) (M7-WW8) 10 ECTS  
 (Materials simulation for NT (M7))

Modulverantwortliche/r: Paolo Moretti, Michael Zaiser  
 Lehrende: Paolo Moretti, Michael Zaiser

---

Startsemester: WS 2017/2018	Dauer: 2 Semester	Turnus: jährlich (WS)
Präsenzzeit: 100 Std.	Eigenstudium: 200 Std.	Sprache: Englisch

---

**Lehrveranstaltungen:**

Multi-scale Simulation Methods I (Lecture) (WS 2017/2018, Vorlesung, 1 SWS, Paolo Moretti)  
 Multi-scale Simulation Methods I (Tutorial) (WS 2017/2018, Übung, 1 SWS, Paolo Moretti)  
 Multi-scale Simulation Methods II (Lecture) (SS 2018, Vorlesung, 1 SWS, Paolo Moretti)  
 Multi-scale Simulation Methods II (Tutorial) (SS 2018, Tutorium, 1 SWS, Paolo Moretti et al.)  
 Nebenfachpraktikum Werkstoffsimulation (SS 2018, Praktikum, 1 SWS, Paolo Moretti et al.)  
 Data Driven Materials Science (WS 2017/2018, Vorlesung, Michael Zaiser)  
 Dislocation Theory and Dislocation Simulation (Lecture) (WS 2017/2018, optional, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)  
 Dislocation Theory and Dislocation Simulation (Tutorial) (WS 2017/2018, optional, Übung, 1 SWS, Michael Zaiser)  
 Foundations of Finite Element Simulation (Lecture) (WS 2017/2018, optional, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)  
 Foundations of Finite Element Simulation (Tutorial) (WS 2017/2018, optional, Übung, 1 SWS, Michael Zaiser)

---

**Inhalt:**

In this modul the foundations and the application of computer-based modeling and simulation methods that are commonly used in computational materials science are learned. Those simulations are an important counterpart to experiments and purely theoretical considerations and have become extremely powerful during the last decades. Knowledge about common simulation methods on different scales together with understanding how the physics transfers into a model and how simulations can be used to answer materials questions will turn out to be very helpful with respect to any major.

**Lernziele und Kompetenzen:**

*Fachkompetenz*

*Wissen*

Lernende können materialwissenschaftliche Anwendungsgebiete von relevanten Simulationsmethoden wiedergeben. Sie sind in der Lage theoretische Grundlagen wiederzugeben (z.B. Kontinuumsmechanik, Vektoren und Tensoren, Finite Elemente, Programmierung mit Python).

*Verstehen*

Lernende können die Rolle von Simulationsverfahren in der Werkstoffwissenschaft aufzeigen. Sie können werkstoffwissenschaftlichen Phänomenen klassifizieren, deren relevante Zeit- und Längenskalen abstrahieren und Mechanismen in Hinblick auf Simulationen abstrahieren und klassifizieren. Sie können die Funktionsweisen von Simulationsmethoden erläutern. Dazu zählen u.a.:

- Diskrete Versetzungsdynamik
- Atomistische Simulationen
- Finite Element Simulation von Elastizität und Plastizität
- Phasenfeldmethode
- Mehrskalensimulationsmethoden

*Anwenden*

Lernende können allgemeine werkstoffwissenschaftliche Simulationsprobleme durch Anwendung von gelerntem Wissen und das Zusammenführen von unterschiedlichen gelernten Techniken und Methoden lösen.

*Analysieren*

Lernende können gezielt eigene Herleitungen von Simulationsmodellen unter vereinfachten Annahmen durchführen.

### *Evaluieren (Beurteilen)*

Lernende können eigene spezielle Modellvarianten aufstellen, oder sich Testfälle ausdenken um gezielt Hypothesen zu testen oder Annahmen zu validieren. Lernende sind in der Lage, zu bewerten, wann ein Simulationsfehler klein, groß, relevant, vernachlässigbar ist.

### *Erschaffen*

Lernende können neue werkstoffwissenschaftliche Simulationsprobleme durch das Zusammenführen von unterschiedlichen gelernten Techniken und Methoden sowie dem kreativen Planen eigenständig und in Kooperation mit anderen Lernenden lösen.

---

### **Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:**

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

#### **[1] Nanotechnologie (Master of Science)**

(Po-Vers. 2015w | TechFak | Nanotechnologie (Master of Science) | Masterprüfung | Naturwissenschaftlich - technisches Wahlmodul)

---

### **Studien-/Prüfungsleistungen:**

Werkstoffsimulation für NT (M7) (Prüfungsnummer: 515743)

(englische Bezeichnung: Materials simulation for NT (M7))

Prüfungsleistung, mündliche Prüfung, Dauer (in Minuten): 20

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100% Prüfungssprache: Deutsch oder Englisch

Erstabledung: SS 2018, 1. Wdh.: WS 2018/2019

1. Prüfer: Paolo Moretti, 2. Prüfer: Michael Zaiser