Modulbezeichnung:	**Kernfach Werkstoffsimulation (COMM)** (Computational Modelling of Materials)	**30 ECTS**
Modulverantwortliche/r:	Michael Zaiser	
Lehrende:	Michael Zaiser, Paolo Moretti	

Startsemester: WS 2017/2018	Dauer: 2 Semester	Turnus: jährlich (WS)
Präsenzzeit: 345 Std.	Eigenstudium: 555 Std.	Sprache: Deutsch

Lehrveranstaltungen:

Pflichtfächer / mandatory courses

Foundations of Computational Materials Science I (Lecture) (WS 2017/2018, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)

Foundations of Computational Materials Science I (Tutorial) (WS 2017/2018, Übung, 1 SWS, Michael Zaiser)

Foundations of Computational Materials Science II (Tutorial) (SS 2018, Tutorium, 1 SWS, Michael Zaiser)

Foundations of Computational Materials Science II (Lecture) (SS 2018, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)

Kernfachpraktikum Werkstoffsimulation (WW8) (SS 2018, Praktikum, Michael Zaiser et al.)

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)

Wahlvorlesungen / elective courses

Numerische Methoden in den Werkstoffwissenschaften - Atomistische Methoden (SS 2018, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Erik Bitzek)

Dislocation Theory and Dislocation Simulation (Lecture) (WS 2017/2018, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)

Dislocation Theory and Dislocation Simulation (Tutorial) (WS 2017/2018, Übung, 1 SWS, Michael Zaiser)

Generalized Continuum Models of Materials Mechanics (SS 2018, optional, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)

Computational models of biomaterial failure (SS 2018, optional, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Paolo Moretti)

Foundations of Finite Element 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)

Seminar Computational Materials Science I (WS 2017/2018, optional, Seminar, 2 SWS, Michael Zaiser et al.)

Seminar Computational Materials Science II (SS 2018, optional, Seminar, 2 SWS, Michael Zaiser et al.)

Modelling Materials with Finite Element Simulations (Lecture) (SS 2018, optional, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)

Modelling Materials with Finite Element Simulations (Tutorial) (SS 2018, optional, Übung, 1 SWS, Stefan Liebenstein)

Multi-scale Simulation Methods II (Lecture) (SS 2018, optional, Vorlesung, 1 SWS, Paolo Moretti)

Multi-scale Simulation Methods II (Tutorial) (SS 2018, optional, Tutorium, 1 SWS, Paolo Moretti et al.)

Inhalt:

This module has a strong emphasis on the theoretical foundations of computer-based modeling and simulation methods that are commonly used in computational materials science. Those will be complemented by applied details of various simulation methods. 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:

Die Studierenden entwickeln ein grundlegendes Verständnis der Rolle rechnergestützter Simulationsverfahren in der modernen Werkstoffwissenschaft. Sie erhalten einen detaillierten und umfassenden Überblick über gängige Simulationsverfahren, deren Anwendung auf Werkstoffprobleme auf verschiedenen Längenskalen sowie die Kopplung verschiedener Methoden im Rahmen der Vielskalensimulation. Sie studieren die praktische Umsetzung von Simulationsaufgaben in der Analyse von Werkstoffproblemen und erhalten die Möglichkeit, aktuelle Entwicklungen im Bereich der atomaren, mesoskopischen oder kontinuumstheoretischen Simulationsmethoden vertiefend zu studieren. Durch fundierte Kenntnisse in den theoretischen Grundlagen der Werkstoffsimulation verstehen die die mit der Formulierung von Simulationsmodellen verbundenen theoretischen Probleme und sind in der Lage, selbständig Modelle zu entwickeln und neuartige Problemstellungen zu bearbeiten. In Vertiefungsvorlesungen erhalten sie einen Einblick in aktuelle Forschungsfragen der Werkstoffsimulation.

Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:

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

[1] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Werkstoffsimulation | 1. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M1) | Werkstoffsimulation)

[2] **Nanotechnologie (Master of Science)**
(Po-Vers. 2015w | TechFak | Nanotechnologie (Master of Science) | Masterprüfung | Kernfachmodul aus MWT, EEI, CBI, Ph, Ch | Kernfachmodul MWT | Werkstoffsimulation)

Studien-/Prüfungsleistungen:

Mündliche Prüfung Werkstoffsimulation (Prüfungsnummer: 64301)

Prüfungsleistung, mündliche Prüfung, Dauer (in Minuten): 40
Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%
weitere Erläuterungen:
none
Prüfungssprache: Deutsch oder Englisch

Erstablegung: WS 2017/2018, 1. Wdh.: SS 2018
1. Prüfer: Michael Zaiser

Unbenoteter Schein Werkstoffsimulation (Prüfungsnummer: 64302)
(englische Bezeichnung: Ungraded Credit: Materials Simulation)

Studienleistung, Praktikumsleistung
weitere Erläuterungen:
Es besteht Anwesenheitspflicht. Das Praktikum ist nur bestanden, wenn alle Versuche sowie alle Vor- und Nachprotokolle erfolgreich absolviert wurden, d.h. die vollständig ausgefüllte Testatkarte mit Nachweisen für Vorprotokolle (Antestate) sowie für Versuchsdurchführungen und Nachprotokolle (Abtestate) fristgerechtvorgelegt wurde.

Erstablegung: WS 2017/2018, 1. Wdh.: SS 2018
1. Prüfer: Michael Zaiser