

Materialwissenschaft im Überblick

Seminar: Computersimulationen in der Materialwissenschaft

Prof. Dr. Blazej Grabowski, blazej.grabowski@imw.uni-stuttgart.de

Die Seminare finden in **Präsenz** im **Rechnerpoolraum Chemie** statt. Der Rechnerpoolraum befindet sich im ersten Stock des Chemiegebäudes Pfaffenwaldring 55 gegenüber dem Café Urknall (vom Café aus ein kleines Stück der Haupttreppe hinauf und zwischen den größeren Tischen hindurch rechts).

ACHTUNG Vorbesprechung Online:

Mittwoch, 27. April 2022, ab 11:00 via WebEx

Den WebEx-Link finden Sie auf ILIAS.

Vortragsdaten:

Mittwoch, 08. Juni 2022, 9:00 – 12:00 (maximal 3 Präsentationen)

Mittwoch, 15. Juni 2022, 9:00 – 12:00 (maximal 3 Präsentationen)

Mittwoch, 22. Juni 2022, 9:00 – 12:00 (maximal 3 Präsentationen)

Mittwoch, 29. Juni 2022, 9:00 – 12:00 (maximal 3 Präsentationen)

Präsentation 20-30 min + wissenschaftliche Diskussion + Präsentationsbesprechung

Bitte erstellen Sie eine Power Point Präsentation. Planen Sie etwa 1 bis 2 min Sprechzeit pro Folie ein.

Themenvorschläge verschiedener Schwierigkeitsgrade finden Sie auf der folgenden Seite. Sie können sich in einer Online-Liste bereits für ein Thema entscheiden.

Den Link zur xoyondo-Liste (ähnlich wie Doodle) finden Sie auf ILIAS.

Sie dürfen aber auch verwandte oder spezialisierte Themen aus dem Bereich der Computersimulationen in der Materialwissenschaft selber vorschlagen.

Themenvorschläge (★★=fortgeschritten) + Literatur

Thema 1: **Dichtefunktionaltheorie**

Literatur: [LeSar, Sholl, SkriptCoMa, SkriptMDAM]

Thema 2: **Austauschkorrelationsfunktional** ★★

Literatur: [Sholl, Parr]

Thema 3: **Beschleunigte Molekulardynamiksimulationen** ★★

Literatur: [Frenkel, Zamora]

Thema 4: **Interatomare Potentiale**

Literatur: [LeSar]

Thema 5: **Machine-learning Potentiale** ★★

Literatur: [Novikov]

Thema 6: **Monte Carlo Methode**

Literatur: [Frenkel, LeSar]

Thema 7: **Kinetic Monte Carlo**

Literatur: [LeSar]

Thema 8: **Cellular Automata**

Literatur: [LeSar]

Thema 9: **Phasenfeldsimulationen**

Literatur: [LeSar, SkriptCoMa]

[SkriptCoMa, SkriptMDAM] wird bei konkretem Interesse ausgegeben.

[Frenkel] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. (Academic Press, 2002 oder 2003).

→ verfügbar in Bibliothek, e.g., MTH 833/2, C 6 Fre (Benutzung vor Ort)

→ oder als Fernleihe

[LeSar] R. LeSar, *Introduction to computational materials science: fundamentals to applications*. (Cambridge Univ. Press, 2013).

→ als Fernleihe verfügbar

[Sholl] D. S. Sholl and J. A. Steckel: *DENSITY FUNCTIONAL THEORY - A Practical Introduction* (Wiley, 2009).

→ verfügbar in Bibliothek (Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Benutzung vor Ort)

[Novikov] Ivan S Novikov et al 2021 Mach. Learn.: Sci. Technol. 2 025002

[Parr] R. Parr and W. Yang, "Density-functional theory of atoms and molecules" (1989).

[Zamora] R. J. Zamora, et al, in Handbook of Materials Modeling: Methods: Theory and Modeling, edited by W. Andreoni and S. Yip (Springer International Publishing, Cham, 2018).

außerdem natürlich erlaubt bzw. empfohlen: andere Bücher, Internet