

Modulbeschreibung: Basic principles of molecular dynamics

Lehrveranstaltung / Teilmodul	Basic principles of molecular dynamics
Studiengang	Maschinenbau (Master)
Semester	2.
Dozent	Prof. N. Gunkelmann
Sprache	Englisch
Zuordnung zum Curriculum	Wahlpflicht Studienrichtung Materialtechnik
Lehrform/ SWS	2 SWS Vorlesung, 1 SWS Tutorium
Arbeitsaufwand	Präsenzzeit: 56 h; Eigenstudium: 94 h
Kreditpunkte	4
Voraussetzungen	Vorausgesetzt werden die Kenntnisse der Vorlesungen Ingenieurmathematik und Physik.
Lernziele	Die Studierenden <ul style="list-style-type: none"> - können atomistische Modellierungstechniken beschreiben und die allgemeine Methode der Molekularydynamik skizzieren. - können die interatomare Wechselwirkung in Metallen, Halbleitern, Keramiken und Biomolekülen erläutern und gegenüberstellen. - sind in der Lage, die Verbindung zwischen thermodynamischen Eigenschaften (Temperatur, Druck) und atomistischer Dynamik aufzuzeigen. - können wichtige Material-Eigenschaften aus atomistischen Simulationen ableiten.
Inhalte	<ul style="list-style-type: none"> - Molekularodynamik: Interatomare Potentiale, Randbedingungen, Integratoren, Thermodynamische Ensembles, Thermo-/Barostate - Molekularstatik: Energieminimierung, Defekte, Spannungsberechnung, elastische Konstanten - Postprocessing: Berechnung von strukturellen Eigenschaften und Eigenschaften wie z.B. Diffusionskoeffizienten, Viskosität und Wärmeleitfähigkeit
Studien- und Prüfungsleistung	Prüfungsform: bis 35 Teilnehmer*innen mündliche Prüfung, sonst Klausur
Medienformen	Tafel, Folien, Beamer, Rechnervorführungen
Literatur	<ol style="list-style-type: none"> 1. M. Griebel, S. Knapek und G. Zumbusch: Numerical Simulation in Molecular Dynamics, Springer, 2007. 2. A. R. Leach: Molecular modelling principles and applications, Pearson Education Ltd., Harlow, 2001, 2nd edition. 3. F. Jensen: Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2007. 4. D. Frenkel und B. Smit: Understanding molecular simulation, Academic, San Diego, 2002, 2nd edition. 5. M. P. Allen and Tildesley: Computer Simulation of Liquids, Oxford Science Publishers, 1987.