

## Modelleren en ontwerp van nanoschaalmaterialen (E006800)

**Cursusomvang** *(nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)*

**Studiepunten 6.0** **Studietijd 180 u**

### Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025

A (semester 1) Engels Gent werkcollege  
hoorcollege

B (semester 1) Nederlands Gent

### Lesgevers in academiejaar 2024-2025

Vanduyfhuys, Louis TW17 Verantwoordelijk lesgever  
Rogge, Sven TW17 Medelesgever

### Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025

	stptn	aanbodsessie
<a href="#">Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting fysica en sterrenkunde)</a>	6	A
<a href="#">European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering Physics</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in de fysica en de sterrenkunde</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in de ingenieurswetenschappen: materiaalkunde</a>	6	B
<a href="#">Master of Science in de ingenieurswetenschappen: toegepaste natuurkunde</a>	6	B
<a href="#">Master of Science in Engineering Physics</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Physics and Astronomy</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Sustainable Materials Engineering</a>	6	A

### Onderwijstalen

Engels, Nederlands

### Trefwoorden

veeldeeltjessystemen, interatomaire interacties, moleculaire dynamica, theorie van de elektronische structuur, spectroscopie, basissen voor golf functies, krachtvelden, ontwerp van nanoschaalmaterialen, elektronische toepassingen (energieconversie, luminescentie), mechanische toepassingen (schokdempers, mechanische sensoren), thermische toepassingen (warmtegeleiders, warmtebaden), structuurkarakterisatie en -voorspelling

### Situering

Ingenieurstoepassingen steunen meer en meer op sterk gespecialiseerde materialen met unieke functionaliteit. Zo bleken geavanceerde functionele materialen als hybride perovskieten, metaal-organische roosters of covalent-organische roosters onontbeerlijk om de uitdagingen van hoogperformante zonnecellen, efficiënt warmtebeheer of responsieve sensoren tegemoet te komen. Om dergelijke materialen op rationele manier te ontwerpen is inzicht op de atomaire schaal nodig. Moleculaire modellering biedt de nodige informatie over fysische verschijnselen die het materiaalgedrag op de nanoschaal bepalen. Het belang van dit interdisciplinaire onderzoeksgebied is de laatste jaren sterk toegenomen door de systematisch groeiende computercapaciteit en voortdurende optimalisatie van fysische modellen en numerieke algoritmes. Toepassingsgebieden zijn dan ook erg divers, gaande van chemie, moleculaire fysica, vastestoffysica en materiaalfysica tot nanofysica.

In dit vak worden modelleertechnieken voor de nanoschaal geïntroduceerd door verder te bouwen op concepten uit de kwantummechanica, de statistische fysica en de atomaire en moleculaire fysica. Daarbij wordt de nadruk gelegd op de toepasbaarheid van deze concepten en de rationele benaderingen die nodig zijn voor het modelleren van realistische en industrieel relevante nanogestructureerde materialen. Verscheidene simulatietechnieken worden in dit vak

besproken en toegepast. Ze gaan van kwantummechanisch geïnspireerde methoden, ideaal voor complexe nanosystemen met een beperkte grootte of over een beperkte tijdschaal, tot krachtveldgebaseerde methoden, die verschijnselen gaande tot microseconden en tientallen nanometers kunnen beschrijven. Deze technieken worden toegepast op structurele, mechanische, spectroscopische en thermische eigenschappen van moleculen en vaste stoffen. Het vak is toegespitst op de ontwikkeling van functionele materialen voor ingenieurstoepassingen in de opslag en omzetting van energie, de detectie van chemische en fysische stimuli en warmtebeheer op de nanoschaal. Studenten zullen met verschillende softwarepakketten leren werken die in het wetenschappelijk onderzoek gangbaar zijn.

## Inhoud

De meest gebruikelijke strategie om nanoschaalsystemen te modelleren is via de Born-Oppenheimerbenadering, die elektronische en nucleaire vrijheidsgraden ontkoppelt. De energie van het systeem herleidt zich dan tot een parametrische functie van de posities van de atoomkernen. Het resulterende multidimensionale hyperoppervlak wordt het potentiële-energieoppervlak (PES) genoemd en bepaalt de structurele flexibiliteit van het beschouwde materiaal. Dit vak toont hoe de PES geconstrueerd kan worden met behulp van kwantummechanische informatie (methodes voor de elektronische structuur) of meer benaderende technieken (krachtvelden), en hoe gepaste bemonstering van de PES toelaat de brug te maken met macroscopische materiaaleigenschappen. Deze methoden worden gebruikt om inzicht te krijgen in het materiaalgedrag op de nanoschaal en om ontwerpstrategieën te ontwikkelen op basis van atomaire informatie.

De cursus bestaat uit de volgende delen:

- 1 Introductie tot moleculair modelleren: typische ingenieurstoepassingen, typische tijd- en lengteschalen, interatomaire interacties
- 2 Bemonsteringstechnieken om macroscopische eigenschappen uit het potentiële-energieoppervlak af te leiden: analyse van normale modes, partitiefuncties, moleculaire dynamica, bemonsteringsmethoden voor zeldzame gebeurtenissen, Monte Carlotechnieken, vibratoire spectroscopie
- 3 Veeldeeltjesmethoden voor de elektronische structuur: Hartree-Fock, post-Hartree-Fock, dichtheidsfunctionaaltheorie, elektronische spectroscopie
- 4 Basissen voor de beschrijving van elektronische toestanden: gelokaliseerde basissen, vlakkegolfbasissen, pseudopotentialen, projectortoegevoegde golfmethode
- 5 Moleculaire mechanica voor het modelleren van grotere systemen op grotere tijdschalen: krachtveldmethoden, partitionering van atomen in moleculen
- 6 Niet-empirisch materiaalontwerp voor de rationele identificatie van materialen met uitstekende prestaties met betrekking tot bv. thermische toepassingen (warmtegeleiding, warmtecapaciteit), mechanische toepassingen (elasticiteitsconstanten, structurele flexibiliteit), elektronische toepassingen (bandkloof, mobiliteit van ladingsdragers, spectrum bij UV/zichtbare/infrarood golflengten)

## Begincompetenties

Dit opleidingsonderdeel bouwt verder op bepaalde eindcompetenties van vakken kwantummechanica, statistische fysica en atoom- en molecuulfysica.

## Eindcompetenties

- 1 Inzicht hebben in de samenstelling van ingenieursmaterialen op de nanoschaal en de belangrijkste interacties die daarbij werkzaam zijn.
- 2 Basisconcepten en -terminologie met betrekking tot het modelleren van nanoschaalmaterialen beheersen.
- 3 In staat zijn om voor een gegeven macroscopisch thermisch, mechanisch of elektronisch probleem in geavanceerde materialen de meest geschikte modellen en benaderingen te selecteren.
- 4 Uitwerken van ontwerpstrategieën voor specifieke toepassingen op basis van theoretische concepten op de nanometerschaal en numerieke aspecten.

## Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk mits gunstige beoordeling van de competenties

## Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

## Didactische werkvormen

Werkcollege, Hoorcollege, Zelfstandig werk

## **Toelichtingen bij de didactische werkvormen**

Hoorcolleges; Oefeningen met de eigen laptop, waarbij moderne modelleerprogramma's gebruikt worden die frequent in dit onderzoeksgebied aangewend worden

## **Studiemateriaal**

Type: Slides

Naam: Slides

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Type: Slides

Naam: Slides Modelling and Engineering of Nanoscale Materials

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Taal : Engels

Beschikbaar op Ufora : Ja

Online beschikbaar : Ja

Beschikbaar in de bibliotheek : Nee

Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

Bijkomende info: Het studiemateriaal bestaat enkel uit slides die gedurende het academiejaar op Ufora geplaatst worden.

## **Referenties**

- D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Academic Press, 2nd edition, 2002.
- R. Parr and W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, 1989.
- R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, 2004.
- E. R. Leite, Nanostructured Materials for Electrochemical Energy Production and Storage, Springer, 2009.
- A. Fereidoon, M. D. Ganji, F. Memarian, and M. Dehghan, Mechanical Properties of Nanostructured Materials: Quantum Mechanics and Molecular Dynamics Insights, Xlibris Us, 2016.
- P. Sanghera, Quantum Physics for Scientists and Technologists: Fundamental Principles and Applications for Biologists, Chemists, Computer Scientists, and Nanotechnologists, Wiley Interscience, 2011.

## **Vakinhoudelijke studiebegeleiding**

De lesgever of medewerkers zijn tijdens of tussen de hoorcolleges of op afspraak bereikbaar voor uitleg; er is begeleiding tijdens de werkcolleges.

## **Evaluatiemomenten**

periodegebonden evaluatie

## **Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode**

Mondelinge evaluatie, Werkstuk

## **Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode**

Mondelinge evaluatie, Werkstuk

## **Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie**

## **Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie**

Niet van toepassing

## **Toelichtingen bij de evaluatievormen**

- Evaluatie in de vorm van een project (beoordeling van werkzaamheid tijdens het project, projectverslag en mondelinge presentatie) en mondelinge ondervraging.
- Tweede examenkans (periodegebonden evaluatie): Mogelijk in gewijzigde vorm.

## **Eindscoreberekening**

