

## Computationele materiaalfysica (E024122)

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

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

### Aanbodsessies in academiejaar 2024-2025

A (semester 2)	Engels	Gent
B (semester 1)	Engels	Gent
C (semester 2)	Nederlands	Gent

### Lesgevers in academiejaar 2024-2025

Cottenier, Stefaan	TW08	Verantwoordelijk lesgever
Kestens, Leo	TW08	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	B
<a href="#">Brugprogramma Master of Science in Sustainable Materials Engineering</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	B
<a href="#">Master of Science in de ingenieurwetenschappen: materiaalkunde</a>	6	C
<a href="#">Master of Science in Physics and Astronomy</a>	6	B
<a href="#">Master of Science in Sustainable Materials Engineering</a>	6	A

### Onderwijstalen

Engels, Nederlands

### Trefwoorden

simulaties op atomaire schaal, materiaalfysica, DFT, 'computational materials design'

### Situering

Alle meetbare eigenschappen van materialen vinden hun oorsprong in interacties tussen de kernen en elektronen waaruit ze opgebouwd zijn. Die interacties worden beschreven door de kwantumfysica. De wiskundige vergelijkingen die daarvoor moeten worden opgelost, zijn sinds lang gekend. Dankzij efficiënte algoritmes en snelle computers kunnen die vergelijkingen in steeds meer gevallen ook effectief opgelost worden. Meetbare eigenschappen van materialen kunnen op die manier rechtstreeks uit de kwantumfysica verklaard worden. Eigenschappen die nog niet gemeten werden, kunnen op dezelfde manier voorspeld worden. In deze cursus leren we via praktische computeroefeningen hoe een hele reeks eigenschappen van vaste stoffen uit de kwantumfysica berekend worden. Gevallenstudies geven een overzicht van het computationeel gereedschap dat voor materiaalkundigen en vaste-stofffysici beschikbaar is om materialen te begrijpen – en zelfs te ontwerpen – op atomair niveau.

### Inhoud

We starten met een conceptuele kijk op de meest gebruikte methode in dit gebied: dichtheidsfunctionaaltheorie (DFT). Na een overzicht van het grote aantal beschikbare DFT-implementaties, gaan we met een van die implementaties aan de slag (gratis en open source, zodat je wat je hier leert later steeds kan blijven gebruiken). Je leert stap voor stap basiseigenschappen van kristallijne materialen voorspellen met DFT: geometrische, elektronische, elastische en chemische

eigenschappen. Er is aandacht voor het inschatten van de betrouwbaarheid van je eigen voorspellingen, én van de (niet altijd even betrouwbare) voorspellingen die je in de wetenschappelijke literatuur ontmoet.

### Begincompetenties

basisbegrippen van vaste-stoffysica en/of materiaalkunde, basisbegrippen van kwantumfysica

### Eindcompetenties

- 1 Een algemene dichtheidsfunctionaaltheoriecode kunnen gebruiken om basiseigenschappen van materialen te voorspellen.
- 2 De basisconcepten achter dichtheidsfunctionaaltheorie kunnen uitleggen.
- 3 De betrouwbaarheid van een met dichtheidsfunctionaaltheorie bekomen voorspelling voor een eigenschap van een materiaal kunnen inschatten.
- 4 Onderzoeksartikelen die dichtheidsfunctionaaltheorie gebruiken kunnen begrijpen en kritisch kunnen beoordelen.
- 5 Een strategie kunnen formuleren om een materiaalprobleem met dichtheidsfunctionaaltheorie aan te pakken.

### 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

Hoorcollege, Zelfstandig werk

### Toelichtingen bij de didactische werkvormen

- Dit vak wordt via **flipped classroom** aangeboden : iedere week bekijk je thuis een reeks video's over het onderwerp, je dient een verslag in met je antwoorden op de vragen/opdrachten die bij de video's horen, en in de wekelijkse feedback webinar bespreken we de problemen die je daarbij ontmoette. Je kiest zelf of je deze feedbacksessie in het leslokaal bijwoont, via livestream volgt, of later een opname ervan bekijkt.
- '**zelf doen**' is belangrijk in dit vak: je leert stap voor stap werken met een DFT-code om materiaaleigenschappen te voorspellen. Je kan deze gebruiken op je eigen laptop. Voor berekeningen die meer rekentijd vragen, heb je toegang tot de high-performance computing omgeving van de UGent.
- Je kan er voor kiezen om in een team van 3-4 studenten gedurende het semester te werken aan een **project** waarin je methodes uit de cursus toepast.
- Dit vak is als open online cursus toegankelijk voor iedereen, **wereldwijd**. Waar mogelijk proberen we interactie tot stand te brengen tussen studenten uit Gent en vrijwillige deelnemers op andere continenten.

### Studiemateriaal

Geen

### Referenties

- Dierk Raabe, "Computational Material Science", Wiley-VCH, 1998, ISBN- 3-527-29541-0 Density Functional Theory: a practical introduction (D.S. Sholl, J.A. Steckel, Wiley 2009)
- Electronic structure – basic theory and practical methods (R. M. Martin, Cambridge 2004)
- Computational Materials Science: from basic principles to material properties (W. Hergert, A. Ernst, M. Däne (ed), Springer 2004)
- Atomistic Computer Simulations: A Practical Guide (V. Brazdova, D.R. Bowler, Wiley 2013) • Understanding Solids: the science of materials (Richard J. D. Tilley, John Wiley & Sons, 2013)
- "Introduction to Materials Modelling", edited by Zoe H. Barber, 2005, Published by The Institute of Metals, London, ISBN 1-902653-58-0

### Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Tijdens het wekelijkse responsiecollege wordt collectieve feedback gegeven op de vragen die gedurende de voorbije week ingediend werden. Het lesuur na het responsiecollege wordt gereserveerd voor studenten met specifieke vragen die zich niet lenen tot collectieve feedback.

## Evaluatiemomenten

periodegebonden en niet-periodegebonden evaluatie

## Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Vaardigheidstest, Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie

## Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Vaardigheidstest, Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie

## Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Vaardigheidstest, Participatie, Peer en/of self assessment, Werkstuk

## Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is enkel mogelijk in gewijzigde vorm

## Toelichtingen bij de evaluatievormen

- Je dient wekelijks een verslag in met je antwoorden op de vragen/opdrachten van die week. De *inspanning* die je daarvoor levert wordt geëvalueerd, niet de *correctheid* van je antwoorden.
- Je kan kiezen voor de optie 'evaluatie via project'. Als lid van een team zal je dan doorheen de cursus aan een project werken: je bestudeert een materialenprobleem met computationele technieken. Op het einde van het semester dient ieder team een geschreven verslag in onder de vorm van een artikel voor een (denkbeeldig) vaktijdschrift, en een gesproken verslag onder de vorm van een 5-minutenvideo. Wie kiest voor deze evaluatie-optie heeft een hogere werklast doorheen het semester, maar ontlast haar/zijn examenperiode.
- Je kan ook kiezen voor de optie 'evaluatie via examen'. Het examen is een mengeling van mondelinge en schriftelijke vragen, gecombineerd met een (korte) opdracht die op de computer uitgevoerd moet worden. Dit examen is open-boek en open-internet. In deze evaluatie-optie is de werkdruk doorheen het semester lager, maar heb je een extra examen in de examenperiode.

## Eindscoreberekening

- wekelijks verslag: 20% (telkens een verslag niet wordt ingediend gaat er 5% af - de score kan echter niet negatief worden)
- indien gekozen voor project: 80% (bepaald via het geschreven verslag en het videoverslag, en dit zowel door de docent als via peer evaluatie tussen teams onderling en binnen elk team - niet iedereen in eenzelfde team krijgt noodzakelijk het zelfde resultaat)
- indien gekozen voor examen: 80%

Voor wie slaagt in het onderdeel 'project' of 'examen' afzonderlijk, worden de punten van project/examen en die van de wekelijkse verslagen opgeteld. Voor wie niet slaagt voor het onderdeel 'project' of 'examen' afzonderlijk, worden de punten van de wekelijkse verslagen bijgeteld tot een maximum van 45% (bvb.: met 6/16 op examen of project en 4/4 voor de wekelijkse verslagen zou de som 10/20 zijn. Omdat deze student niet geslaagd is op het onderdeel examen of project afzonderlijk, worden van de 4 punten voor de wekelijkse verslagen slechts 3 in rekening gebracht. De totaalscore is dus 9/20 (=45%).

## Faciliteiten voor werkstudenten

Alle lesinhoud is op ieder moment via vooraf opgenomen video's beschikbaar. De wekelijkse responsiecolleges worden live gestreamed en opgenomen.