MH2046 Kvantmetallurgi 6,0 hp

Quantum Metallurgy

Fastställande

Skolchef vid ITM-skolan har 2019-10-15 beslutat att fastställa denna kursplan att gälla från och med HT 2020, diarienummer: M-2019-2207.

Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Materialvetenskap, Materialteknik

Särskild behörighet

Grundläggande kunskaper om kvantmekanik och Schrödingerekvationen motsvarande kurs MH1026 Materialfysik, samt ab initio beräkningar och täthetsfunktionalitetsteorier (DFT), motsvarande kurs MH2048 Avancerad kurs i materialdesign.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

- Tillämpa grundläggande principerna för kvantmetallurgiska strategier och dess begränsningar med avseende på storleken på de utvärderade systemen och tidsskalan
- Identifiera vilken typ av materialvetenskapligt problem (defektbildningsenergi, mekaniskt, kinetiskt etc.) som är möjligt att lösa eller kan lösas med hjälp av ab initio verktyg samt komma fram till den förväntade noggrannheten och tillförlitligheten för ab initio modellering för olika egenskaper och material
- Motivera för och använda en av de tillgängliga ab initio-koderna, installera strukturen för motsvarande ab initio-modellering och göra val av huvudparametrar för första-princip-beräkningar

Kursinnehåll

Grunder för statistisk fysik,
molekylärdynamik,
Monte Carlo metoder,
översikt av kvantmekaniken,
bandstruktur, ferminivå,
kemiska bindningens natur,
densitetsfunktionell teori,
beräkning av strukturell stabilitet av metaller och legeringar och energi för olika defekter.
Beräkning av mekaniska och elektriska egenskaper, simulering av fasövergångar.
Noggrannhet och begränsningar hos tekniken.
Översikt över programvaror.

Examination

- PRO1 - Projektuppgift, 6,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.