



BB2340 Teoretisk materialdesign 7,5 hp

Theoretical Materials Design

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

Fastställande

Kursplan för BB2340 gäller från och med HT07

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Bioteknik

Särskild behörighet

Tre år av studier vid kemi, kemiteknik och bioteknologi på KTH eller motsvarande. Kurser i kvatmekanik, kvantkemi och molekylär modellering är behjälpliga. Viss datorvana.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Att uppnå viss förståelse av grundläggande egenskaper hos molekyler och material. Att rationalisera egenskaper med hjälp av begrepp inom kemin, t.ex kemisk bindning och elektronstruktur. Att lära sig något om rationell design av material i syfte att uppnå vissa specifika egenskaper. Att känna till några grundläggande begrepp inom modellering av egenskaper, såsom optiska, magnetiska och elektriska egenskaper, och förstå sambandet mellan dessa egenskaper och experimentell karaktärisering av materialen. Att uppnå vissa praktiska erfarenheter av beräkning av materialegenskaper.

Kursinnehåll

Elektriska och magnetiska fält växelverkande med molekyler och material.

Grundläggande tekniker för evaluering av molekylära egenskaper.

Optisk teknik: Optisk absorption, fluorescence, phosphorescence och dikroism.

Röntgenteknik: Röntgendiffraktion och Röntgenspektra.

Magnetism från det molekylära perspektivet: Magnetisering och molekylära magneter.

Magnetisk resonans: Kärnmagnetiska resonans egenskaper och elektronparamagnetiska resonans egenskaper.

Molekylär elektronik: Grundläggande egenskaper hos molekylära elektronik komponenter.

Relationer mellan mikroskopiska och makroskopiska egenskaper.

Material med periodisk symmetri: polymerer och kristaller.

Material utan periodisk symmetri: amorfa material och biomolekyler.

Nanomaterial och nanopartiklar

Att förstå samband mellan struktur och egenskap och mellan struktur och funktion.

Några tumregler för rationell design av egenskaper.

Översikt av modern modellering av molekyler och material.

Kurslitteratur

Kurs bok - "Molecular Materials with Specific Interactions" W.A. Sokalski, ISBN-10: 1-4020-5371-1. Kompendium med instruktion till datorövningar.

Examination

- TEN1 - Tentamen, 6,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F

- ÖVN1 - Datorövningar, 1,5 hp, betygsskala: P, 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.

Övriga krav för slutbetyg

1. Skriftlig examination.
2. Skriftlig redogörelse av datorövningarna.

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.