FMH3304 Termodynamisk modellering- utvärdering av termodynamiska egenskaper 6,0 hp

Computational Thermodynamics- Assessment of Thermodynamic Properties

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

Fastställande

Kursplan för FMH3304 gäller från och med VT19

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Legeringars termodynamik, mjukvaran Thermo-Calc klassisk version / konsollversion

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Kursen syftar till att ge studenterna grundläggande förståelse för hur termodynamiska egenskaper hos olika faser kan utvärderas och användas för att skapa konsistenta termodynamiska beskrivningar av legeringssystem. Kursen vänder sig till doktorander som vill sätta sig in i grundläggande termodynamisk modellering och beräkningar. Kursen behandlar hur olika faser modelleras och vilken typ av experimentell information som kan användas för att passa modellparametrarna d v s fasdiagram- och termokemisk information såsom aktivitet, bildningsentalpi, värmekapacitet etc, men också ab initio beräknad information.

Efter genomgången kurs ska studenten kunna:

- koppla kristallografi till termodynamiska modeller
- läsa relevant vetenskaplig litteratur och ur denna korrekt kunna extrahera experimental information för använding i termodynamisa utvärderingar och för att jämföra med beräknade resultat.
- använda ab initio beräknad information i termodynamiska utvärderingar.
- skriva en vetenskaplig artikel om utvärdering av ett specifikt legeringssystem.

Kursinnehåll

Termodynamisk modellering med hjälp av Calphadmetoden dvs innefattande olika experimentella tekniker och hur informationen används, användning av ab initio-information, assessmentteknik.

Examination

- INL1 - Inlämningsuppgift, 6,0 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.

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.