



FMH3623 Seminariekurs i materialvetenskap på atomär skala 6,0 hp

Seminar Course in Atomic- scale Materials Science

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

Fastställande

Kursplan för FMH3623 gäller från och med HT14

Betygsskala

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Antagen till forskarutbildning.
Grundläggande kvantmekanik och statistisk fysik kurser eller motsvarande

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Kursen är avsedd för doktorander som specialiserar sig på materialvetenskap. Dess främsta mål är att ge studenterna nödvändiga kunskaper och erfarenhet inom utveckling av atomär skala modeller av fasta material (metall-och halvlederlegeringar) samt atomistiska modeller av kinetiska processer i sådant material.

Efter genomgången kurs ska studenten kunna:

1. Ange de grundläggande förutsättningarna och tillämpningsgränserna för befintliga teoretiska modeller inom fasta tillståndets fysik.
2. Bestäm om en kvantmodellering eller en klassisk mekanisk modellering är tillämplig på ett särskilt problem inom materialvetenskap och teknik.
3. Välja en optimal modell (i termer av noggrannhet kontra komplexitet) för ett visst material eller en process.
4. Applicera modellen och kritiskt granska de modellbaserade förutsägelser genom att relatera dem till experimentella observationer på äkta material.
5. Rationalisera experimentella data som erhållits om komplexa system i form av enkla atomistiska modeller.

Kursinnehåll

Datorstödd teoretisk modellering processer i atomär skala i material är numera allmänt använd i materialforskning, för att komplettera de traditionella forskningsansatserna (experiment och teori). En introduktion till metoder för atomär-modellering ges inom kursen. Tyngdpunkten kommer att läggas vid så kallade first-principle beräkningar, där det studerade systemet anses kvantmekaniskt som en samling av elektroner och atomkärnor, och atomistiska simuleringar såsom Monte Carlo-metoden och molekylärdynamik.

Kursen består av en seminarieserie i Atomic-scale Materials Science (AMS), med regelbundet deltagande av ledande forskare, postdocs och doktorander. Seminarierna ges varje vecka från samtliga seminariedeltagarna, enligt det schema som upprätthålls av kursens sekreterare (normalt en doktorand). Presentationer av seniora forskare ska vara korta föreläsningar om aktuella ämnen inom AMS, litteraturstudier, eller forskningsnyheter. Varje student får i uppdrag att gå igenom periodiska tidskrifter eller ett antal kapitel om ett specifikt ämne inom first principle eller modellering i atomär skala (efter överenskommelse med lärare) och förbereda minst tre seminariepresentationer (45 min. varje) om ämnet.

Kurslitteratur

1. R. Martin, "Electronic Structure. Basic theory and Practical Methods" (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
2. D.G. Pettifor, "Bonding and Structure of Molecules and Solids" (Clarendon Press, Oxford, 1995).
3. D. Frenkel and B. Smit, Understanding molecular simulation: from algorithms to applications (Academic Press: San Diego, 1996).

4. V. Bulatov and W. Cai, Computer simulations of dislocations, (Oxford Univ. Press: Oxford, 2006); Online material <http://micro.stanford.edu/~caiwei/CSD-Book/>

5. Presentationsbilder och kompletterande kursmaterial, som delas ut till seminariedeltagarna via e-post.

Examination

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.

För att framgångsrikt klara kursen skall studenten:

- delta i min. 15 seminarier,
- förbereda och leverera min. 3 presentationer/föreläsningar och motstå frågor från publiken

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.