



FMH3700 Introduction to the EMTO Program Package 1 9,0 hp

Introduction to the EMTO Program Package 1

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

Fastställande

Kursplan för FMH3700 gäller från och med VT14

Betygsskala

undefined

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Grundläggande kunskaper i fasta tillståndets fysik; kvantmekanik; täthetsfunktionalteori; elektroniska strukturmetoder.

Goda kunskaper i Unix, Linux och Windows OS samt tillgång till superdatore

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Kursens mål är att ge grundläggande kunskap i kvantmekanisk ab-initio modellering av slumpmässiga legeringar genom användande av datorprogrammet EMTO. Det finns idag endast ett fåtal teoretiska verktyg som är passande för att ge en ab-initio beskrivning av legeringar. Den särskilda styrkan hos EMTO-metoden, som placerar EMTO-programmet i fokuset av modern materialdesignsberäkning, är att den korrekt kan ta hänsyn till anisotropa gitterdistortioner hos slumpmässiga legeringar, och kan därför användas för att undersöka fenomen bakom termofysiska, kemiska, strukturella, mekaniska etc. egenskaper hos kemiska och magnetiska legeringar på atomnivå. Efter denna introduktionskurs kommer studenterna att ha baskunskap i användandet av EMTO-programmet; de kommer att kunna applicera EMTO-metoden på enkla system och kunna beräkna fundamentala bulkegenskaper (tillståndsekvationer och elastiska egenskaper) hos monoatomiska samt kemiskt oordnade multikomponentslegeringar.

Kursinnehåll

EMTO paketet, komponenter och användande; Installation; Förberedelse av beräkning; strukturell information; kluster i reella rummet; kemiskt ordnade och oordnade system; Brillouinzon-sampling; Green's funktion; Exekvering av programmets delar; Läsa av och förstå output; Extrahera data ifrån output; Tillståndsekvationer; DOS; Fermiytor; Exempel;

Kurslitteratur

L. Vitos: Computational quantum-mechanics for materials engineers: The EMTO method and applications

(Springer-Verlag, 2007).

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.

Skriven rapport

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.

