



FMH3704 Kvantmetallurgy- Ab-initio beräkningsverktyg för materialvetenskap 6,0 hp

Quantum Metallurgy- First- Principles Computational Tools for Materials Science

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

Fastställande

Kursplan för FMH3704 gäller från och med VT14

Betygsskala

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Antagen till forskarutbildning

SK1113 Fysik eller liknande.

MH1016 Materialfysik, eller liknande.

Grundläggande ingenjörsmatematik med differentialekvationer.

Undervisningspråk

Undervisningspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter avslutad kurs kommer studenten att veta hur att:

-identifiera materialvetenskapliga problem där den kvantmetallurgiska strategin kommer att vara användbar.

-formulera materialvetenskapliga problem på ett sätt så att de blir tillgängliga för den kvantmetallurgiska strategin

-Samverka med experter för att utföra beräkningar med hjälp av kvantmetallurgiska strategin

-Beräkna energi för olika defekter.

-Samverka med experter för att beräkna mekaniska och elektriska egenskaper.

-Förutsäga beteendet för små system genom att använd den kvantmetallurgiska strategin

-Samverka med experter för att beräkna vissa kinetiska egenskaper.

-Uppskatta noggrannhet och begränsningar hos tekniken.

Kursinnehåll

Översikt, grunden för statistisk fysik, Molekylärdynamik, Monte Carlo metoder, översikt av kvantmekaniken, bandstruktur, Fermi nivå, 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.

Kurslitteratur

R. Martin, "Electronic Structure. Basic theory and Practical Method

D.G. Pettifor, "Bonding and Structure of Molecules and Solids".

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.

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.