



FMH3704 Kvantmetallurgi- 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 VT19

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Antagen till forskarutbildning

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter avslutad kurs kommer studenten att veta hur man:

- identifierar materialvetenskapliga problem där den kvantmetallurgiska strategin kommer att vara användbar.
- formulerar materialvetenskapliga problem på ett sätt så att de blir tillgängliga för den kvantmetallurgiska strategin
- samverkar med experter för att utföra beräkningar med hjälp av kvantmetallurgiska strategin
- beräknar energi för olika defekter.
- samverkar med experter för att beräkna mekaniska och elektriska egenskaper.
- förutsäger beteendet för små system genom att använd den kvantmetallurgiska strategin
- samverkar med experter för att beräkna vissa kinetiska egenskaper.
- uppskattar 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.

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.