



FMH3927 Termodynamisk modellering 7,5 hp

Computational Thermodynamics

Fastställande

Kursplanen gäller från och med HT 2024 enligt fakultetsnämndsbeslut: M-2024-0018.
Beslutsdatum: 2024-10-14.

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Antagen till forskrutbildning

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

1. förklara grundläggande begrepp inom termodynamisk modellering

2. använda termodynamiska samband för lösningsfaser (fasta faser, smältor och gasfas).
3. modellera dessa faser med enklare modeller och med subgitterformalismen (Compound Energy Formalism).
4. Illustrera samband mellan termodynamiska relationer, Gibbs energi och fasdiagram.
5. utföra analytiska och numeriska beräkningar av termodynamiska problem.

Kursinnehåll

- Termodynamiska modeller för fasta faser, smältor och gasfas
- Modellering av fast substitutionell och interstitiell lösning, karbider, oxider och intermetalliska faser.
- Modellering av metalliska smältor och slagger.
- Kopplingen mellan Gibbs energi och fasdiagram.
- Utläsning av storheter såsom kemisk potential, drivande krafter etc ur molära Gibbs energidiagram.
- Referenstillstånd och byte av referenstillstånd och byte av komponenter.
- Fasdiagram och jämvikter.
- Datorberäkningar av jämvikter, fasdiagram, drivande krafter mm.
- Grundläggande kunskap och nomenklatur av kristallstrukturer.
- Introduktion till Calphadmetodiken.

Examination

- INL1 - Inlämningsuppgift, 3,5 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - Skriftlig tentamen, 4,0 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.

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

För godkänt krävs minst betyg C på TEN1

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.