



# FSH3141 Flerskalemodellering av kärntekniska material 6,0 hp

Multi-scale Modeling of Nuclear Materials

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

## Fastställande

Kursplan för FSH3141 gäller från och med VT14

## Betygsskala

## Utbildningsnivå

Forskarnivå

## Särskild behörighet

Studenterna bör ha en magister/master i materialvetenskap eller fysik.

Kunskap om kristallstrukturer är nödvändigt för kursen. En bra bakgrund i materialteori är till fördel.

Kunskap om koncept som diffusion, fasdiagram och elektronstruktur är till fördel.

## Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

## Lärandemål

För nuvarande och framtida kärnkraft är strålningsinducerade förändringar av materialegenskaper ett stort problem. Svällning, försprödning och kryp begränsar livslängden för de strukturella material och andra komponenter som används i reaktorerna. Med utvecklingen av den fjärde generationens kärnkraftssystem och fusionsreaktorer är dessa problem förstärkta på grund av höga doser av snabba neutroner. Experiment på kärntekniska material är dyra och tidskrävande och därför är realistiska simuleringar och modellering en viktig del av lösningen.

Efter denna kurs ska studenterna kunna

1. beskriva, och när tillämpligt jämföra, olika simuleringstekniker. Studenterna ska även kunna ställa upp en metod att länka samman flera modelleringstekniker för att kunna behandla större rymdskalor och längre tidsrymder.
2. applicera de olika simuleringsteknikerna som presenterats under föreläsningar och laborationer med hjälp av de programkoder som använts i kursen. För övrigt ska de nu kunna lösa mer komplexa problem genom att applicera tidigare kunskaper i materialteori.
3. förklara begränsningarna för de olika simuleringsteknikerna och välja den bäst anpassade för ett givet problem. De ska kunna analysera sina resultat och förklara hur de kan förbättras. De ska veta var de kan söka efter mer information om avancerade simuleringstekniker som inte behandlas under kursen.
4. presentera sina resultat i seminarieform och med en skriftlig rapport. De ska kunna lyfta fram de viktigaste punkterna i den muntliga framställningen medans mer detaljer ges i rapporten. En klar och tydlig vetenskaplig diskurs förväntas i båda medier.

## Kursinnehåll

### Kursupplägg

Studenterna kommer använda den teoretiska och praktiska bakgrund som presenteras under föreläsningar och behandlas i laborationer för att lösa ett originellt problem i projektform.

Den lärarledda undervisningen består av 7 stycken föreläsningar och 4 stycken datorlaborationer. Föreläsningarna är menade ta två timmar styck.

1. Bakgrund och motivation för materialmodellering
2. Strålskademekanismer och effekten av strålning
3. Täthetsfunktionalteori (DFT)
4. Molekyldynamik (MD) och interatomära potentialer
5. Kinetisk Monte-Carlo och Rate teori - del 1
6. Kinetisk Monte-Carlo och Rate teori - del 2
7. Sammanlänkning av simuleringstekniker och introduktion till avancerade metoder

Varje datorlaboration planeras ta fyra timmar. Studenterna kan välja, men lärarens hjälp, ett system eller material som de ska modellera, givet att tillräckliga resurser finns tillgängliga

1. Datorlaboration 1: DFT

2. Datorlaboration 2: MD
3. Datorlaboration 3: KMC
4. Datorlaboration 4: Rate teori

## Kurslitteratur

Delas ut av läraren.

## 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.

## Övriga krav för slutbetyg

För att bli godkänd krävs närvaro. Frånvaro ska meddelas läraren och kommer medföra extra uppgifter att utföra.

Studenten ska lösa ett eget valt originellt problem med hjälp av de redskap de tillskansat sig under kursens gång. Projektet skall vara meningsfullt och ej ett typiskt läroboksexempel. Projektet kräver att en kombination av metoder används på det sätt som är typiskt för materialvetenskap.

Resultaten kommer presenteras under ett slutseminarium och i en skriftlig rapport. Studenterna kan arbeta individuellt eller i par.

## 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.