



# MH1028 Termodynamisk modellering för materialdesign 6,0 hp

Computational Thermodynamics for Materials Design

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

## Fastställande

Kursplan för MH1028 gäller från och med HT19

## Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

## Utbildningsnivå

Grundnivå

## Huvudområden

Teknik

## Särskild behörighet

MH1027 Materials termodynamik, eller motsvarande

## Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

## Lärandemål

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

- använda termodynamiska samband specifikt de relevanta inom termodynamisk modellering.
- illustrera samband mellan termodynamiska relationer, Gibbs energi och fasdiagram.
- utföra enklare termodynamiska beräkningar för hand.
- använda korrekt svensk och engelsk terminologi.
- presentera stringenta skriftliga lösningar till problem inom termodynamiken.
- använda termodynamisk och kristallografisk programvara.

## Kursinnehåll

- Grundläggande termodynamik för unära, binära och högre ordningens system.
- Enklare termodynamiska modeller såsom ideal och reguljär lösning.
- Kopplingen mellan Gibbs energi och fasdiagram.
- Utläsning av storheter såsom kemisk potential, drivande krafter etc ur molära Gibbs energidiagram.
- Fasdiagram och jämvikter.
- Datorberäkningar av jämvikter, fasdiagram, drivande krafter mm.
- Grundläggande kunskap och nomenklatur av kristallstrukturer.
- Programvara för visualisering av kristallstrukturer.
- Svensk och engelsk terminologi.
- Introduktion till Calphadmetodiken.

## Kurslitteratur

Meddelas i kurs-PM, vid kursstart

## Examination

- LAB1 - Datorlaboration, 3,0 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - Skriftlig tentamen, 3,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, 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.