



MH1028 Termodynamisk modellering för materialdesign 6,0 hp

Computational Thermodynamics for Materials Design

Fastställande

Kursplanen gäller från och med höstterminen 2026 enligt fakultetsnämndsbeslut: PA-2026-011. Beslutsdatum: 2026-08-26.

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Grundnivå

Huvudområden

Teknik

Särskild behörighet

MH1027 Materials termodynamik, eller motsvarande

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.

Examination

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

Övergångsbestämmelser

Kontakta kursansvarig

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.