MH2046 Kvantmetallurgi 6,0 hp

Quantum Metallurgy

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

Fastställande

Kursplan för MH2046 gäller från och med VT11

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Materialteknik,Materialvetenskap

Särskild behörighet

SK1110 Fysik eller liknande.

Materialfysik, eller liknande.

Basic engineering mathematics including differential equations.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- identifiera materialvetenskapliga problem där den kvantmetallurgiska strategin kommer att vara användbar.
- formulera materialvetenskapliga problem på ett sätt så att de blir tillgängliga för den kvantmetallurgiska strategin
- Samverka med experter för att utföra beräkningar med hjälp av kvantmetallurgiska strategin
- Beräkna energi för olika defekter.
- Samverka med experter för att beräkna mekaniska och elektriska egenskaper.
- Förutsäga beteendet för små system genom att använd den kvantmetallurgiska strategin
- Samverka med experter för att beräkna vissa kinetiska egenskaper.
- Uppskatta noggrannhet och begränsningar hos tekniken.

Kursinnehåll

Översikt, grunden för statistisk fysik, Molekylärdynamik, Monte Carlo metoder, översikt av kvantmekaniken, bandstruktur, Ferminivå, 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.

Kurslitteratur

Utdelat material

Examination

- PRO1 - Projektuppgift, 6,0 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.