MH2048 Avancerad kurs i materialdesign 9,0 hp

Advanced Course in Materials Design

Fastställande

Denna kursplan att gälla från och med VT 2020, diarienummer: M-2019-1319.

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Materialteknik

Särskild behörighet

MH2017/MH2038, Mikro- och nanostrukturer, eller motsvarande

MH2040 Tillämpad termodynamik och kinetik, del 1, eller motsvarande

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

· Konstruera en materialdesigns karta (system design chart) och kritiskt diskutera designstrategier för ett material som ska uppfylla vissa prestandakrav inkluderande väsentliga länkverktyg och relevant in- och utdata.

· Klassificera och jämföra länkverktyg ur ett övergripande multiskal-perspektiv samt förklara deras integrering i ICME (Integrated Computational Materials Engineering)-ramverket och relatera dem till Materialdesign.

· Använda mjukvaruverktygen Thermo-Calc, DICTRA och TC-PRISMA för att lösa materialdesignproblem och översiktligt beskriva kritiska parametrar för Ab initio- och fasfält-simuleringar (PFM).

· Presentera resultat från ett projektarbete i en skriftlig rapport och muntligt vid ett seminarium.

Kursinnehåll

· Konceptet beräkningsbaserad materialdesign (Computational Materials Design)

· Principer och verktyg för materialdesign, materials genom och ICME.

· Fortsatta studier med DICTRA för simulering av diffusionskontrollerade fastomvandlingar.

· Introduktion till TC-PRISMA för simulering av utskiljningsreaktioner.

· Introduktion till Ab initio beräkningar med användning av täthetsfunktionalitetsteorier (DFT).

· Introduktion till fasfältsmetoden (PFM).

Kurslitteratur

Anges i kurs-PM vid kursstart.

Examination

- PRO1 - Projektuppgift, 6,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F
- NÄR1 - Närvaro, 1,0 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - Skriftlig tentamen, 2,0 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.

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

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.