MH1028 Termodynamisk modellering för materialdesign, 6 hp

Kursens syfte

Syftet med kursen är att ge grunden till hur datorbaserade termodynamiska beräkningar och modeller kan användas för tillämpningar inom materialdesign.

Kursens huvudsakliga innehåll

- 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.

Lärandemål

Studenten ska efter avklarad kurs kunna

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

Kursens uppbyggnad

Föreläsningar (2 h), räknestugor (4x3 h) och datorövningar (5x3 h). Redogörelserna i form av svar på quizzar på Canvas besvaras senast en vecka efter resp. räknestuga/datorövning.

Examinator & föreläsare

Malin Selleby (malin@kth.se)

Övningsassistenter

Fredrik Haglöf (fredrikk@kth.se)
Axel Forslund (axefor@kth.se)

Litteratur

Kompendier och annat kursmaterial läggs upp på Canvas.

Examination

LAB1 – Räknestugor och datorövningar, 3 hp, betygsskala: P-F (LM 1-6)

TEN1 E-del: 40 p på grundläggande nivå LM1-5. För betyg E krävs minst 32 p.

TEN1 D-A-del: 20 p. Rättas endast om 32 p uppnåtts på A-delen. LM 1-5 avancerad nivå.

Kursbetyget sätts efter erhållet betyg på TEN1.

Studentexpeditionen, ITM

Har du frågor kring kursregistrering, omregistrering och tentaanmälan maila gru@itm.kth.se

För kursanmälan – kontakta din studievägledare.

Kompensatoriskt stöd för studenter med funktionsnedsättning vid examination

För studenter med funktionsnedsättning som har utlåtande från KTH:s FUNKA-enhet om rekommenderade stödinsatser vid examination gäller följande i denna kurs:

- Alla stödinsatser under kod R (d.v.s. anpassningar som rör rum, tid och fysisk omständighet) beviljas utan särskilt beslut av examinator
- Stödinsatser under kod P (pedagogisk anpassning) ska aktivt beviljas eller avslås av examinatorn efter kontakt tagen av studenten i enlighet med KTHs regler. I normalfallet kommer även stödinsatser under kod P att tillstyrkas.

Schema, tentativt (ev. ändringar införs i KTH:s schema-generator)

Vecka	Veckodag	Datum	Tid	Aktivitet	Innehåll
v 3	Måndag	2021-01-18	13-15	F1	Introduktion till kursen. Fasdiagram och kopplingen till Gibbs energi. (TER & FAS)*
v 3	Onsdag	2021-01-20	10-12	F2	Fortsättning fasdiagram.
v 3	Fredag	2021-01-22	13-16	R1 (E1)	Konstruktion av fasdiagram från Gibbs energikurvor.
v 4	Måndag	2021-01-25	10-12	F3	Termodynamikens lagar. CT* kap 1 Calphad och Demo Thermo-Calc.
v 4	Onsdag	2021-01-27	15-18	DL1 (CE1)	Binära fasdiagram.
v 4	Fredag	2021-01-29	10-12	F4	Forts. CT kap 1
v 5	Måndag	2021-02-01	15-17	F5	Forts. CT kap 1 (Gibbs fasregel. Drivande kraft. etc)
v 5	Onsdag	2021-02-03	15-18	R2	Grundläggande termodynamik.
v 5	Fredag	2021-02-05	9-12	DL2	Grundläggande termodynamik.
v 6	Måndag	2021-02-08	~~10-12~~ 13-15	F6	Faser och kristallstrukturer.
v 6	Onsdag	2021-02-10	15-18	DL3	Faser och kristallstrukturer (datorprogram VESTA)
v 7	Måndag	2021-02-15	13-15	F7	Modeller för lösningsfaser. CT kap 2
v 7	Onsdag	2021-02-17	13-16	R3	Termodynamik för lösningsfaser.
v 7	Fredag	2021-02-19	9-12	DL4	Termodynamik för lösningsfaser.
v 8	Måndag	2021-02-22	13-15	F8	Forts. CT kap. 2. Byte av referenstillstånd etc.
v 8	Onsdag	2021-02-24	10-12	F9	Ternära fasdiagram. Isotermer. Isopleter.
v 8	Torsdag	2021-02-25	15-18	R4	Fasdiagram del II.
v 9	Måndag	2021-03-01	15-17	F10	Fas- och egenskapsdiagram. CT kap. 3
v 9	Tisdag	2021-03-02	13-16	DL5	Fasdiagram del II.
v 9	Fredag	2021-03-05	10-12	F11	Inför tentan.
v 11	Torsdag	2021-03-18	14-18	Tentamen	
v 23	Torsdag	2021-06-10	14-18	Omtenta	

*TER, FAS och CT refererar till kompendium som finns på Canvas.