

Elektronisk strukturteori, 7.5 hp

Electronic Structure Theory, 7.5 credits

Forskarutbildningskurs

6FIFM33

Institutionen för fysik, kemi och biologi

Gäller från: Första halvår 2025

Fastställd av

Fastställandedatum

Diarienummer

Behörighetskrav

Grundläggande behörighet till kurser på forskarutbildningsnivå har den som har

- avlagt en examen på avancerad nivå,
- fullgjort kursfordringar om minst 240 högskolepoäng (hp), varav minst 60 hp på avancerad nivå, eller
- på något annat sätt förvärvat motsvarande kunskaper.

Kursen förutsätter inga förkunskaper i simuleringar av första principerna. Emellertid krävs grundläggande kunskaper i kvant- och fasta tillståndets fysik för att förstå kursmaterialet.

Särskild information

Denna kurs syftar till att ge en teoretisk bakgrund bakom state-of-the-art metoder för kvantsimuleringar av materialegenskaper. En serie om 10 föreläsningar kommer att ägnas åt grunderna för lösningen av problemet med elektronisk struktur i fasta ämnen med hjälp av planvågsbasuppsättningar och all-elektrontekniker.

Lärandemål

Efter avslutad kurs förväntas* *studenten kunna att skapa:

Kunskap och förståelse

-av teoretiska metoder för kvantsimuleringar av materialegenskaper;

-av grunderna för lösningen av det elektroniska strukturproblemet

Färdighet och förmåga med

-projekt med VASP-paket

-numeriska metoder i fasta tillståndets fysik

Kursinnehåll

Föreläsningarna som introducerar metoderna kommer att kompletteras med datorövningar. Under dessa praktiska lektioner kommer studenterna att köra ett miniprojekt, som inkluderar flera simuleringar med VASP-paket, för att tillämpa de tekniker som diskuteras i föreläsningarna och bekanta sig med detta paket. Examination sker i form av en muntlig projektpresentation

Undervisnings- och arbetsformer

Föreläsningar och datorövningar

Examination

Examination sker i form av en muntlig projektpresentation.

Betygsskala

Tvågradig skala

Kurslitteratur

- R. M. Martin "Electronic Structure. Basic Theory and Practical Methods"
(Cambridge University Press, Cambridge, 2004).

Övrig information

Planering och genomförande av kursen skall utgå från kursplanens formuleringar. Kursvärdering samt analys och förslag som rör generell utveckling och förbättring av kursen återkopplas till Forsknings- och forskarutbildningsnämnden av kursansvarig lärare