

**Elektronisk strukturteori, 7.5 hp**

Electronic structure theory, 7.5 credits

Forskarutbildningskurs

6FIFMB2

Institutionen för fysik, kemi och biologi

Gäller från: Andra 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-elektrontechniker.

## Lärandemål

Efter avslutad kurs förväntas studenten kunna skapa:

- teoretiska metoder för kvantsimuleringar av materialegenskaper;-
- grunderna för lösningen av det elektroniska strukturproblemet
- 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).