



Fakulteten för teknik- och naturvetenskap  
Fysik  
Kursplan

**Beslut om inrättande av kursen**

Kursplanen är fastställd av Fakultetsnämnden vid Fakulteten för teknik- och naturvetenskap, 2008-11-26 och gäller från vårterminen 2008 vid Karlstads universitet.

**Kurskod:** CBAD82

**Beräkningsfysik, 7.5 hp**

**(Computational Physics, 7.5 ECTS Credits)**

**Utbildningsnivå:** avancerad nivå

**Successiv fördjupning:** A1F (Avancerad nivå, har kurs/er på avancerad nivå som förkunskapskrav)

**Undervisningsspråk**

Undervisningen sker på engelska men kan också ske på svenska om alla kursens deltagare är svensktalande.

**Behörighetskrav**

För tillträde till kursen fordras följande godkända kurser (eller motsvarande): Kvantfysik I, Kvantfysik II, Fasta tillståndets fysik, samt Matematisk fysik I.

**Huvudområde**

FYA (Fysik)

**Lärandemål**

En student som genomfört kursen med godkänt resultat skall kunna

- använda numeriska metoder för att modellera fysikaliska system på olika längd- och tidsskalor
- kritiskt välja olika numeriska metoder för att lösa olika typer av fysikaliska och tekniska problem
- implementera numeriska algoritmer i MATLAB, samt visualisera resultatet av beräkningarna
- beskriva grunderna för, samt kunna använda FEM för att lösa partiella differentialekvationer
- beskriva grunderna för, och kunna använda stokastiska simuleringsmetoder som Monte-Carlo-metoden
- beskriva och använda molekylodynamisk simulering
- använda variationsmetoden för lösning av kvantmekaniska problem
- beskriva olika metoder för beräkning av fasta materials elektronstruktur.

**Kursens huvudsakliga innehåll**

Kursen introducerar viktiga numeriska fysikaliska beräkningsmetoder inom tre huvudområden: kontinuum-metoder, stokastiska metoder och kvantmekaniska metoder. Numeriska beräkningar implementeras i MATLAB, samt med rutiner ur C- och Fortran-bibliotek.

**Kursinnehåll:**

Grunderna för finita-element-metoden (FEM). Användande av FEM för lösning av hållfasthetsproblem. Lösning av Schrödingerekvationen med variationsmetoden. Beräkning av elektronstrukturen i kristallina material: introduktion till Hartree-Fock-metoden och täthetsfunktionalteori (DFT). Simuleringar med molekylär dynamik, introduktion till kvant-molekylär dynamik. Monte Carlo-metoden. Parallellisering och högprestandaberäkningar.

## Kurslitteratur och övriga läromedel

Se separat dokument.

## Examination

Examinationen sker i form av lösning av obligatoriska implementeringsuppgifter som presenteras i skriftlig och muntlig form, samt skriftlig och muntlig presentation av ett fördjupningsarbete. Obligatoriskt deltagande i kursens redovisningsseminarier krävs för godkännande.

## Betyg

Kursen bedöms enligt betygsskalan Underkänd, 3 (Godkänd), 4 (Icke utan beröm godkänd) eller 5 (Med beröm godkänd).

## Kvalitetsuppföljning

Under och efter kursen sker en uppföljning av måluppfyllelse och förutsättningar för lärande i kursen. Dess främsta syfte är att bidra till förbättringar. Studenternas erfarenheter och synpunkter är ett av underlagen för granskningen, och inhämtas med hjälp av skriftlig kursvärdering och/eller kursvärderingsdiskussioner. Studenterna informeras om resultaten och eventuella beslut om åtgärder.

## Kursbevis

Kursbevis erhålls på begäran av studenten.

## Övrigt

Studenter som påbörjat en utbildning enligt den studieordning som började gälla 1993-07-01 skall fullfölja sina studier enligt den utbildningsplan de är antagna till.

Om de vid studiernas slut vill få ut ett kursbevis eller examensbevis enligt den nya studieordningen, som trädde i kraft 2007-07-01, skall de prövas mot de kriterier som karakteriserar denna studieordning.

Regler för utbildning på grundnivå och avancerad nivå vid Karlstads universitet reglerar studenters och anställdas skyldigheter och rättigheter.

Kursen är obligatorisk inom civilingenjörsprogrammet Teknisk fysik och masterprogrammet Nanomaterial.

Karlstads universitet 651 88 Karlstad  
Tfn 054-700 10 00 Fax 054-700 14 60  
information@kau.se www.kau.se