



Fakulteten för hälsa, natur- och teknikvetenskap
Fysik

Kursplan

Beräkningsfysik

Kurskod:	CBAD82
Kursens benämning:	Beräkningsfysik <i>Computational Physics</i>
Högskolepoäng:	7.5
Utbildningsnivå:	Avancerad nivå
Successiv fördjupning:	Avancerad nivå, har kurs/er på avancerad nivå som förkunskapskrav (A1F)

Huvudområde:

FYA (Fysik)

TKA (Teknisk fysik)

Beslut om fastställande

Kursplanen är fastställd av Fakulteten för hälsa, natur- och teknikvetenskap 2016-09-05 och gäller från vårterminen 2017 vid Karlstads universitet.

Behörighetskrav

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

Lärandemål

Efter avslutad kurs skall studenten 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 elektronstrukturteori
- 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
- använda befintliga elektronstrukturprogrampaket för beräkning av spektroskopiska egenskaper

Innehåll

Kursen introducerar viktiga numeriska fysikaliska beräkningsmetoder inom olika områden. Numeriska beräkningar implementeras i MATLAB, samt med rutiner ur C- och Fortran-bibliotek.

Kursinnehåll:

Grunderna för elektronstrukturteori och beräkningsmetoder.

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 U (Underkänd), 3 (Godkänd), 4 (Icke utan beröm godkänd) eller 5 (Med beröm godkänd) inom ingenjörsprogram. Inom övriga program och för fristående kurs används betygsskalan U (Underkänd), G (Godkänd) eller VG (Väl 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 i enlighet med gällande regelverk. Studenterna informeras om resultaten och eventuella beslut om åtgärder.

Kursbevis

Kursbevis utfärdas på begäran.

Övrigt

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 samt på påbyggnadsprogrammet mot civilingenjörsexamen i teknisk fysik.