



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 2023-09-04 och gäller från vårterminen 2024 vid Karlstads universitet.

Behörighetskrav

Numeriska metoder (7,5 hp), Matematisk fysik II (7,5 hp), Fasta tillståndets fysik (7,5 hp). Registrerad på Kvantfysik II (7,5 hp). Motsvarandebedömning kan göras.

Gymnasiets Engelska kurs 6. Motsvarandebedömning kan göras.

Lärandemål

Efter avslutad kurs ska 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, samt visualisera resultatet av beräkningarna

- beskriva grunderna för elektronstrukturteori
- använda variationsmetoden för lösning av kvantmekaniska problem
- beskriva olika metoder för beräkning av fasta materials elektronstruktur
- använda befintliga elektronstrukturprogrampaket för beräkning av spektroskopiska egenskaper
- beskriva grunderna för, och kunna använda stokastiska simuleringsmetoder som Monte-Carlo-metoden
- beskriva och använda molekylodynamisk simulering

Innehåll

Kursen introducerar viktiga numeriska fysikaliska beräkningsmetoder inom olika områden. De numeriska simuleringarna implementeras i ett lämpligt programmeringsspråk (till exempel Fortran, C, MATLAB, Python) eller utförs i dedikerade simuleringsprogram.

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 uppgifter som presenteras individuellt och i skriftlig form, samt skriftlig och muntlig presentation av ett individuellt självständigt fördjupningsarbete. Obligatoriskt deltagande i kursens redovisningsseminarier krävs för godkännande.

Om studenten har ett beslut från Karlstads universitet om riktat pedagogiskt stöd på grund av dokumenterad funktionsnedsättning har examinator rätt att ge studenten en anpassad examination eller att låta studenten genomföra examinationen på ett alternativt sätt.

Betyg

Kursen bedöms enligt betygsskalan Väl godkänd (VG), Godkänd (G) eller Underkänd (U). För studenter på ingenjörsprogram används betygsskalan Med beröm godkänd (5), Icke utan beröm godkänd (4), Godkänd (3) eller Underkänd (U).

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

Gällande 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.

