



FAKULTETEN FÖR HÄLSA, NATUR- OCH TEKNIKVETENSKAP
FYSIK

Beräkningsfysik

Computational Physics

Kurskod: FYAD82

Högskolepoäng: 7.5

Utbildningsnivå: Avancerad nivå

Successiv fördjupning: Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav (A1N)

Huvudområde: TKA (Teknisk fysik), FYA (Fysik)

Fastställd av

Utbildningsutskottet vid fakulteten för hälsa, natur- och teknikvetenskap,
2026-09-02

Giltig från och med

Vårtermin 2027

Behörighetskrav

Fysik 30 hp inkluderande Termodynamik och statistisk fysik 7,5 hp och Fasta tillståndets fysik 7,5 hp. Matematik 30 hp inkluderande Linjär algebra 7,5 hp samt Numeriska metoder 7,5 hp. Gymnasiets Engelska 6 alternativt Engelska, nivå 2. Motsvarandebedömning kan göras.

Lärandemål

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

1. använda numeriska metoder för att modellera fysikaliska system på olika längd- och tidsskalor,
2. kritiskt välja olika numeriska metoder för att lösa olika typer av fysikaliska och tekniska problem,
3. implementera numeriska algoritmer samt visualisera resultatet av beräkningarna,
4. beskriva grunderna för elektronstrukturteori,
5. använda variationsmetoden för lösning av kvantmekaniska problem,
6. beskriva olika metoder för beräkning av fasta materials elektronstruktur,
7. använda elektronstrukturprogrampaket för beräkning av spektroskopiska egenskaper,
8. beskriva grunderna för och kunna använda stokastiska simuleringsmetoder som Monte Carlo-metoden samt
9. 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 Mycket väl godkänd (5), Väl 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.