



INSTITUTIONEN FÖR FYSIK

FYM320 Beräkningsmetoder för material- och molekylfysik, 7,5 högskolepoäng

Computational materials and molecular physics, 7.5 credits

Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Institutionen för fysik 2019-11-04 och senast reviderad 2023-05-08. Den reviderade kursplanen gäller från och med 2024-01-15, vårterminen 2024.

Utbildningsområde: Naturvetenskapligt 100 %

Ansvarig institution: Institutionen för fysik

Inplacering

Kursen ingår i masterprogrammet i fysik.

Kursen kan ingå i följande program: 1) Physics, Master Program (N2PHY) och 2) Complex Adaptive Systems, Master Program (N2CAS)

Huvudområde

Fysik

Fördjupning

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

Förkunskapskrav

Kandidatexamen i fysik eller motsvarande, inklusive 30 hp matematik (inbegripet linjär algebra och analys) samt programmering.

Kunskaper om beräkningsfysik och numeriska metoder rekommenderas.

Sökande måste påvisa kunskaper i engelska: engelska 6/engelska B från svenska gymnasiet, eller motsvarande nivå av ett internationellt erkänt test, till exempel TOEFL, IELTS.

Lärandemål

Syftet med kursen är att beskriva olika beräkningsmetoder inom material och

molekylvetenskap, samt ge praktisk erfarenhet av att utföra dessa beräkningar på moderna datorkluster. Kursen avser att presentera hur fysik kan tillämpas i ett mycket bredare sammanhang inom materialforskning än vad som vanligtvis behandlas i den traditionella läroplanen, tack vare ökad datorkraft.

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

- Förstå och analysera olika elektronstrukturmeter, så som Hartree-Fock och täthetsfunktionalsteori
- Förstå och analysera olika molekylodynamik samt Monte Carlo-rutiner som kan användas för att undersöka materialegenskaper med hjälp av datorer
- Använda Python för lösa numeriska problem samt att styra och organiserar större beräkningsuppgifter och för att ge enkel visualisering
- Skriva tekniska rapporter där beräkningsresultat presenteras på ett tydligt sätt
- Kommuniera resultat och slutsatser

Innehåll

- Grunderna i Hartree-Fock samt täthetsfunktionalsteori
- Beräkningsmetoder för elektronstruktur
- Beräkningsmetoder för mångpartikelsystem
- Python

Former för undervisning

Grundläggande teori och metoder täcks av en serie föreläsningar. Studenterna får träning att tillämpa teori och metoder genom övningar och hemuppgifter. En betydande del av kursen består i att utföra storskaliga beräkningar med hjälp av nationella datorkluster.

Undervisningsspråk: engelska

Former för bedömning

Examinationen består av olika hemuppgifter där kodning samt rapportskrivning är viktiga moment, samt presentation av ett relevant ämne inom kursen. Examinationen kan anpassas till tidigare bakgrund och intressen, t. ex finns möjligheten att driva större individuella forskningsprojekt. Alla moment kommer att graderas.

Om student som underkänts två gånger på samma examinerande moment önskar byte av examinator inför nästa examinationstillfälle, ska sådan begäran inlämnas skriftligt till institutionen och bifallas om det inte finns särskilda skäl däremot (HF 6 kap § 22).

I det fall en kurs har upphört eller genomgått större förändringar ska student garanteras minst tre examinationstillfällen (inklusive ordinarie examinationstillfälle) under en tid av

minst ett år, dock som längst två år efter det att kursen upphört/förändrats. Vad avser praktik och VFU gäller motsvarande, men med begränsning till endast ett ytterligare examinationstillfälle.

Betyg

På kursen ges något av betygen Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U).

Kursvärdering

Resultatet och eventuella förändringar i kursens upplägg ska förmedlas både till de studenter som genomförde värderingen och till de studenter som ska påbörja kursen.