



MH2425 Simulering och modellering på atomär skala 6,0 hp

Simulation and Modelling on the Atomic Scale

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

Fastställande

Kursplan för MH2425 gäller från och med VT10

Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Materialteknik, Materialvetenskap

Särskild behörighet

IF1621 Kvantmekanik I, eller liknande:

- Quantum mechanics or quantum physics, introductory level.
- Solid state physics or semiconductor physics, introductory level
- Numerical methods, introductory level

Undervisningspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

När du är klar med den här kursen kommer du att kunna utföra DFT beräkningar av vissa enklare materialegenskaper (t.ex. täthet, bulk modulus, bandgap). Du kommer också att kunna analysera resultaten av dina beräkningar, och förstå begränsningarna i DFT beräkningar. För att göra det, måste du kombinera dina datorkunskaper (Matlab, Linux) med din kunskap om kvantmekanik, atomfysik, numeriska metoder och fasta tillståndets fysik. Du får också "state-of-the-art" information om tillämpningar av DFT beräkningar.

Kursinnehåll

Repetition av grundläggande kvantmekanik och fasta tillståndets fysik (operatörer, Schrödinger-ekvationen, förväntningsvärden, atomorbitaler, lösa Schrödingerekvationen i sfäriska koordinater, variational kalkyl, Blochs teorem, Bravais gitter, ömsesidig utrymme, bandstruktur, k-poäng). Elektron-elektron växelverkan. Exchange. Korrelation. Single-partikel modell. Effektiv potential. Homogena elektron gas. Thomas-Fermi modellen. Funktionell derivat. Teoretiska grunderna av DFT. Kohn-Sham ekvation. DFT modeller för heliumatomen och numeriska lösningar av denna (i Matlab) med finita differensmetoder. Beräkning och analys av enklare materialegenskaper med hjälp av ett DFT programpaket. Bedömning av osäkerheten i beräkningarna. Begreppen självkonsekvens och enhetlighet i DFT beräkningar. Begränsningar av DFT beräkningar. State-of-the-art tillämpningar av DFT beräkningar.

Kursupplägg

Föreläsningar 8 h, 4x2h

Datorlaborationer 40 h (i.e. 10x4h)

Kurslitteratur

Jos Thijssen, "Computational Physics", Cambridge University Press, 2007.

Richard M. Martin "Electronic Structure, Basic Theory and Practical Methods", Cambridge University Press, 2004.

Examination

- LABA - Laboration, 2,0 hp, betygsskala: P, F
- TENA - Tentamen, 4,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

Besvara samtliga inlämningsuppgifter och datorövningar. Närvaro vid gästföreläsningar. Skriftlig tentamen i slutet av kursen.

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.