



FMH3703 Elektronstruktur - grundläggande teorier och beräkningsmetoder 6,0 hp

Electronic Structures - Basic Theories and Computational Methods

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

Fastställande

Kursplan för FMH3703 gäller från och med VT14

Betygsskala

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Antagen till forskarutbildning.

Kvantfysik, basnivå

Fasta tillståndets fysik, avancerad nivå

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

- 1) Efter kursen ska studenten ha en förståelse för beräkningsmodeller för att beskriva och analysera elektroniska strukturer av många-elektronsystem, som tex fasta material.
- 2) Kunna härleda de grundläggande teorierna bakom Born-Oppenheimer approximationen, den Hohenberg-Kohn täthetsfunktionalteorin, Kohn-Sham modellen, och lokaltäthetsapproximationen den lokala densitet.
- 3) Kunna diskutera fördelarna och nackdelarna med de olika beräkningsmetoder, som LAPW, APW + lo, PAW, och pseudopotential.
- 4) Förstå de underliggande problemen i DFT/LDA, samt att förstå vad som krävs för att gå bortom dessa approximationer, tex med hjälp av till exempel icke-lokala densitet functionals och/eller tidsberoende DFT.
- 5) Ha grundläggande kunskaper om kvantmolekyldynamik och Monte Carlo-simuleringar.

Kursinnehåll

Teorier om mångpartikelsekvationen för kondenserade material. Diskussion om funktionaler, funktionalderivatan, och användningen av funktionalderivatan när man löser mångpartikelsekvationen för Hartree och Hartree-Fock approximationerna. Härledning av Born-Oppenheimer approximationen. Härledning av underliggande teoremerna för täthetsfunktionalteorin. Härledning av Kohn-Sham-ekvationen. Diskussion om Brillouin-zonen och det reciproka rummet för beskrivelse av kondenserade material. Härledning av Kohn-Sham-ekvationen i det reciproka rummet. Diskussioner om basset och representation för elektronens vågfunktion i kondenserade material. Diskussioner om teorier bortom den traditionella täthetsfunktionalsteori

Kurslitteratur

- 1) Kurskompendium: "Brief Introduction to the Density Functional Theory" (45 sidor)
- 2) Richard M. Martin, "Electronic Structure - Basic Theory and Practical Methods" (624 sidor), Cambridge Univ Press. 2004, ISBN 0-521-78285-6

Examination

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.

Skriftlig rapport samt muntlig presentation

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.