

**KURSPLAN**

# **Beräkningsmetoder för nanomaterial 7,5 högskolepoäng F7051T**

**Computational Methods for Nanomaterials**

**Kursplan antagna: Höst 2023 Lp 1 - Tills vidare**

**BESLUTSDATUM  
2023-02-15**

# Beräkningsmetoder för nanomaterial 7,5 högskolepoäng F7051T

## Computational Methods for Nanomaterials

### Avancerad nivå, F7051T

Utbildningsnivå	Fördjupningskod	Betygsskala	Ämne	Ämnesgrupp (SCB)
Avancerad nivå	A1F	U G#	Fysik	Fysik

## Behörighet

M0047M Differentialkalkyl, M0048M Linjär algebra och integralkalkyl samt M0049M Linjär algebra och differential kalkyl; F0047T Kvantfysik; F7045T Fasta tillståndets fysik eller motsvarande. Kunna skriva enkla dataprogram (t.ex. D0009E). Goda kunskaper i engelska motsvarande Engelska 6.

Det är fördelaktigt att kunna använda Matlab eller Gnuplot för data-analys, och ha läst F7035T Statistisk fysik och termodynamik samt M0014M Matematisk fysik, eller motsvarande.

## Urval

Urvalet grundas på 30-285 högskolepoäng

# Mål/Förväntat studieresultat

Efter godkänd kurs skall studenterna kunna:

## 1. Kunskap och förståelse

- Förklara den fysikaliska bakgrunden och implementeringen för modellering i elektronstruktur- och dynamiksimuleringar.
- Förklara principen för olika beräkningsmetoder.
- Exemplifiera vad elektronstruktur- och dynamiksimuleringar kan användas för och beskriva vilken typ av frågeställningar som kan besvaras.
- Värdera hur beräkningsfysik passar in i dagens forskning inom material- och produktutveckling.

## 2. Färdighet och förmåga

- Tillämpa olika beräkningsmetoder.
- Studenterna skall kunna designa elektronstrukturberäkningar och dynamiksimuleringar för ökad förståelse av materialrelaterade tillämpningar.
- Planera, genomföra, analysera och redovisa elektronstruktur- och dynamiksimuleringar
- Identifiera och korrigera vanliga felkällor i beräkningar
- Kunna välja lämpligt metod att använda för att beskriva olika system och egenskaper
- Kunna värdera och bedöma beräkningsresultat
- Kunna nämna olika experimentella metoder som ger information om egenskaper av intresse

## 3. Värderingsförmåga och förhållningssätt:

- Kunna avgöra vilka metodförenklingar och modellantaganden som kan göras för att utföra meningsfulla simuleringar.
- Ska kunna kritiskt utvärdera resultat, modell och förenklingar.
- Kunna göra fysikaliska förklaringar av data.
- Kunna relatera och jämföra beräkningsresultaten med experimentella data.

# Kursinnehåll

Introduktion i elektronstrukturbeskrivning av fasta-ämnen och nanostrukturer

Överblick i olika metoder för elektronstrukturberäkningar.

Grundbeskrivning samt fördelar och begränsningar för olika beräkningsmetoder.

Överblick i olika experimentella metoder för undersökning av fasta-ämnen och nanostrukturer.

Tillämpning av olika metoder beroende på systemets längd-skala och på excitationens tid-skala.

Beskrivning av grundtillstånd med täthetsfunktionalteori (DFT) samt genomgång av metoder för beräkning av exciterade tillstånd.

Monte Carlo (MC) simuleringar

Atom-spinn dynamik (ASD) simuleringar

Molekyl Dynamik (MD) simuleringar

Introduktion till och användning av supradatorer (t.ex. Kebnekaise vid HPC2N, Umeå) för att genomföra simuleringar.

## Genomförande

Kursens undervisningspråk samt undervisningsform anges för varje kurstillfälle och framgår av kursidan på Luleå tekniska universitets hemsida.

Undervisningen sker i form av lektioner med teoretisk karaktär, självstudie av material tilldelat av läraren samt obligatoriska laborationer. Studenterna förväntas studera den rekommenderade materialet samt aktiv delta i diskussioner.

Under laborationens gång kommer studenten att börja tillämpa olika delar av teorin genom att planera och utföra simuleringar av olika system och material. Resultaten från laborationen redovisas skriftlig i form av en rapport. För att kunna nå kursensmål måste laborationsrapporten vara strukturerad som en vetenskaplig rapport med fokus på analys av resultat och fysikalisk tolkning av data.

## Examination

Om det finns beslut om särskilt pedagogiskt stöd, i enlighet med Riktlinjen Studentens rättigheter och skyldigheter vid Luleå tekniska universitet, finns möjlighet till anpassad eller alternativ examinationsform.

Skriftlig redovisning av laborationer.

## Otillåtna hjälpmedel vid prov och bedömning

Om en student, genom användande av otillåtna hjälpmedel, försöker vilseleda vid prov eller när en studieprestation ska bedömas, får disciplinära åtgärder vidtas.

Uttrycket "otillåtna hjälpmedel" betyder de hjälpmedel som lärare i förväg inte uppgett som tillåtna hjälpmedel och som kan vara till hjälp vid lösandet av examinationsuppgiften. Detta innebär att alla hjälpmedel som inte uppgetts som tillåtna är otillåtna.

## Kursgivare

Institutionen för teknikvetenskap och matematik (TVM)

## Moduler

Kod	Benämning	Betygsskala	Hp	Tillstånd	Gäller från	Titel
0005	Laborationer och skriftlig redovisning	U G#	7,5	Obligatorisk	H23	

## Studiehandledning

Studiehandledning finns i lärplattformen Canvas före kursstart. Du som är ny student hittar all information du behöver på [www.ltu.se/studentwebben/ny-student](http://www.ltu.se/studentwebben/ny-student). Du som redan studerar vid Luleå tekniska universitet hittar information om kursstart via schema på studentwebben alternativt via kursrummet i lärplattformen. Du når lärplattformen via Mitt LTU.

## Revidering fastställd

av Mats Nässröm, Huvudansvarig utbildningsledare 2023-02-15

## Kursplanen fastställd

av Mats Näsström 2018-02-15