



LUNDS
UNIVERSITET

Naturvetenskapliga fakulteten

**FYST27, Fysik: Elektronstrukturen hos fasta ämnen och ytor,
7,5 högskolepoäng**

Electron Structur of Solids and Surfaces, 7.5 credits

Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är en historisk, äldre version, faställd av Naturvetenskapliga fakultetens utbildningsnämnd 2012-09-03 och gällde från och med 2012-09-03.

Allmänna uppgifter

Kursen är en valbar kurs på avancerad nivå för en naturvetenskaplig master- eller kandidatexamen i fysik. Kan även läsas som fristående kurs.

Undervisningsspråk: Engelska

Huvudområde

Fysik

Fördjupning

A1F, Avancerad nivå, har kurs/er på avancerad nivå som förkunskapskrav

Kursens mål

Kursens mål är att studenter efter avslutad kurs skall ha förvärvat följande kunskaper och färdigheter:

Kunskap och förståelse

Efter avslutad kurs ska studenten:

- Kunna ge bakgrunden till och förklara den praktiska tillämpningen av de teoretiska metoder och modeller som användes för en kvantitativ beskrivning av elektronstrukturen hos kristallina material.
- Kunna visa förmåga att kunna tillgodogöra sig det huvudsakliga innehållet av de originalartiklar som publiceras i tidskrifterna.

Färdighet och förmåga

Efter avslutad kurs ska studenten:

- I enklare fall kunna använda och tolka resultaten av flera av de programpaket för elektronstrukturberäkningar som idag finns tillgängliga i forskarsamhället.

Kursens innehåll

Kursen består av följande moment:

1. Utgående från mångpartikel teori ges en förklaring till relevansen hos enpartikelekvationer samt till begreppen utbyte och korrelation.
2. De huvudsakliga begreppen inom täthetsfunktionalteori för grundtillståndsegenskaper hos molekyler och fasta kroppar. De enklaste approximationerna och deras kvalitet beskrivs.
3. Begreppen kvasipartiklar och deras själv-energier går igenom och användes för att beskriva fotoemission. Vi presenterar enkla approximationer för själv-energier och vi diskuterar approximationernas noggrannhet.
4. Olika metoder för att lösa enpartikelekvationer används, såsom:
 - Bloch's teorem, reciproka rummet, Brillouin zoner i två och tre dimensioner, rotationssymmetrier, klassificeringar och matriselement.
 - Planvågor och pseudopotentialer.
 - Lineära metoder för bandproblemet, huvudsakligen LAPW och LMTO-metoden.
 - Enpartikel Green-funktioner, Slater-Koster för störställen och adsorbater samt ytillstånd.

Kursens genomförande

Undervisningen består av föreläsningar kombinerat med praktiska övningar.

Kursens examination

Kursen examineras genom en muntlig tentamen samt ett antal individuella inlämningsuppgifter. Studenten ska dessutom delta på kursens obligatoriska moment. För studerande som ej godkänts vid ordinarie tentamen erbjuds ytterligare tentamenstillfälle i nära anslutning härtil.

Betyg

Betygskalan omfattar betygsgraderna Underkänd, Godkänd, Väl godkänd. För godkänt betyg på hela kursen krävs godkänd tentamen, godkända individuella inlämningsuppgifter samt deltagande i alla obligatoriska moment. Slutbetyget avgörs genom en sammanvägning av resultaten på de moment som ingår i examinationen.

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs FYSN17 Kvantmekanik och FYSC13 Fasta Tillståndets Fysik, eller motsvarande. Viss erfarenhet av programmering rekommenderas.