

2015第一原理材料計算初階課程

Spring School on First principles Computational Materials Research Introductory Level I

時間：2015年5月16日至5月17日 (上午3小時上課，下午電腦實習課)

地點：國家高速網路與計算中心 (新竹市科學園區研發六路7號)

廿一世紀是尖端材料科技與生物科技的時代，於是對尖端材料與有機分子微觀結構的瞭解就顯得愈來愈重要，這包括其電子結構、光學性質、溫度的影響、磁的特性、機械的特性等。廿世紀初期由於量子力學的發現，使我們有機會從微觀的角度去探討以上的問題，人們希望尋找一個第一原理的材料計算方法。所謂「第一原理」是指在計算過程中不需要由實驗提供參數，只要知道材料組成的元素便可直接從解其對應的薛丁格方程，求出其所有的物性。但由於這是一個多電子的問題，處理起來非常困難，直到六十年代 W. Kohn 提出局部密度泛函近似理論 (LDA) 才使這個沉潛多年的問題重露曙光，經過多年電腦模擬計算的驗證，LDA能對非強關性系統提供一個非常好的基態描述，而隨著高速電腦效能的日新月異，使第一原理材料計算方法穩步成長。高科技產業是台灣經濟的命脈，國內需要更多這方面的人才，本中心為推廣第一原理材料計算的研究，將於2015年5月16日至17日舉辦「第一原理材料計算初階課程」，上午上課，下午電腦實習。歡迎對探索尖端材料微結構有興趣的相關系所同學參加。

課程內容：局部泛函理論、虛位勢近似法、與表面現象(如表面重構、表面能、功函數) 計算方法

實習內容：本課程以VASP為實習課的計算程式，塊材的總能計算、電子能帶及態密度分佈之計算，金屬表面之表層收縮、表面能、及功函數之計算，分子之鍵長及鍵能之計算。

[1] 中心將於暑期推出「第一原理材料計算進階課程」，該課程只接受具第一原理材料計算經驗之學員參加。

[2] 學員需具備量子物理的理論基礎。本課程將以國家高速網路與計算中心作計算平台，所以學員需對Unix 之常用指令及 vi 編輯器有一定的認識。我們將提供被錄取之學員一函授的課程，此課程包括如何在Window 環境建立 Unix 的使用環境 (cgywin)，Unix 的常用指令及 vi 編輯器的介紹，此外，此課程還包括能帶理論的介紹。以上之函授課程包含講義及老師上課的錄影，請學員務必於正式上課前完成此函授課程。

[3] Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) 可參閱VASP之網站 <http://www.vasp.at/>

[4] 本課程之教材將置於中心之相關網站，歡迎參閱，上課時中心將提供講義。

對象：全國各大專院校相關系所同學及相關研究人員。經主辦單位審核，中心將公告並個別通知。若錄取人數超過50人，將加開第二梯次。(預定6/6-6/7上課)

費用：免註冊費，但需保證金1000元。全程參與者，中心將補助住宿費。(新竹縣市不補助)

報名時間：2015年4月20日截止。

報名方式：填寫報名表，郵寄/傳真報名。

學生報名時請附上300字參加動機與未來研究規劃、歷年成績單(已通過博士班資格考者僅需附上通過證明)、推薦教授簽名及聯絡方式。



聯絡人：Ms. Chen, 陳小姐

地址：30013 新竹市光復路二段101號
國家理論科學研究中心物理組

電話：03-5731265 ; Fax : 03-5735086

E-mail：cmr@phys.cts.nthu.edu.tw

主辦單位：國家理論科學研究中心、
國家高速網路與計算中心