

2026 第一原理材料計算初階課程

2026 First Principles Computational Materials Research-Introductory Level



活動地點：國立清華大學

日期：2026年6月22日 (第一梯次) / 6月23日 (第二梯次)

簡介

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2026年6月22日至23日舉辦「第一原理材料計算初階課程」，上午上課2小時，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

授課內容

涵蓋局部密度泛函理論(LDA/GGA)、虛位勢近似法，以及表面重構、表面能與功函數等表面現象之計算原理。

實習內容

本課程全程使用 VASP 軟體進行實作。內容包含塊材總能、電子能帶結構及態密度分佈 (DOS) 計算；金屬表面之表層收縮、表面能與功函數模擬；以及分子鍵長與鍵能之基礎計算。

參加對象：全國大專院校相關系所學生及研究人員

錄取說明：由主辦單位審核後公告錄取名單。

報名相關

報名日期：2026年5月13日截止。

報名方式：線上報名，並以Email報名審查資料。

審查資料：

- (1)200字參加動機與未來研究規劃。
- (2)推薦教授簽名。
- (3)歷年成績單。(已通過博士班資格考者僅需附上通過證明)

保證金：

- (1)除教授/老師外，學生及博後均需預繳保證金1,000元。
- (2)現職於業者不需繳交保證金。

註冊費：

- (1)在職/在學於學術單位將由國家理論科學研究中心物理組補助。
- (2)現職於業者需繳交註冊費4,000元。

課程四階段

為持續推動第一原理材料計算課程，今年初階課程以實體課程實施，錄取學員中心將郵寄講義並提供教學影片、國家高速網路與計算中心使用帳號及其他相關教材。



階段1

5/29-6/19
自主學習

自行觀看課程錄影並完成程式計算練習。

階段2

6/22 第一梯次
6/23 第二梯次
實體課程

依錄取梯次現場參與以及與老師深度討論預習與實作所產生疑義。

階段3

6/22-7/3
成果考核

於期限內繳交指定作業，通過即具參加進階課程資格。

階段4

8/3-8/7
進階課程

進階報名：7/10-7/24

NOTE

[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。

主辦單位：國家理論科學研究中心物理組

協辦單位：國家高速網路與計算中心

活動地點：國立清華大學

課堂講授：物理館R124教室

電腦實習：綜合二館2F, 計算機與通訊中心, 電腦教室I、III

聯絡資訊：renee@phys.ncts.ntu.edu.tw / 03-5742256

報名網址：<https://reurl.cc/j6DAYn>



NAR Labs 財團法人國家實驗研究院

國家高速網路與計算中心

National Center for High-performance Computing



報名截止
2026年5月13日

