

2017 年创腾学院 Materials Studio 分子模拟软件培训班

—— CASTEP 暑期特训班通知

培训时间：8月7日-11日, 共五天

培训地点：北京大学

培训主题：CASTEP 暑期特训班

特聘讲师：李明宪教授 (MS CASTEP Pseudopotential 前四代数据库 1992 - 2014 的主要作者)

培训简介：

本次暑期特训班特聘台湾淡江大学李明宪教授全程授课、答疑。李教授对 CASTEP 模块有着深入的了解和丰富的使用经验, 并且长期从事相关的科研、教学工作。在此次为期五天的培训中, 李教授将深入浅出的介绍 CASTEP 的原理、参数, 各类性质的计算及操作技巧。课程既包含实际的上机演练, 也涵盖了理论讲解和答疑, 非常适合需要深入了解分子模拟方法以及学习 CASTEP 的各位老师和同学。

CASTEP 是由剑桥凝聚态理论研究组开发的一款基于密度泛函理论的先进量子力学程序。程序采用平面波函数描述价电子状态, 利用赝势替代内层电子, 适于解决固体物理, 材料科学、化学以及化工等领域中的各类问题。

一、授课对象：欢迎所有对分子模拟以及 CASTEP 第一性原理材料设计感兴趣的老师、同学参加。

二、培训日程：

日期	时间	培训内容
8月6日	14:00-17:00	报到和注册
		报到地点：北京大学
第一天 (图形接口与 密度泛函方法)	08:00-09:00	报到和注册
		报到地点：北京(具体地点待定)
	09:00-11:40	Materials Studio 与 CASTEP 快速入门、认识晶体结构与晶体结构数据库、模型建构技巧、接口之标准 3D 功能
	11:40-12:10	培训班合影
	12:10-13:30	午餐时间(餐后可回宿舍休息或直接去教室上机, 工程师 13:00 开始答疑)
	13:30-17:00	密度泛函理论与 CASTEP 平面波赝势方法介绍; 预测基本物性 (I) 了解原子轨域与目睹化学键、电子局域化函数、晶体场分裂、姜-泰勒效应
	17:00-18:00	工程师答疑时间
第二天 (能带结构的 理论与能带结 构相关之基本 物性)	09:00-11:55	能带结构的理论与其计算方法简介: 倒空间、k-点、布里渊区、能隙问题及其修正、强关联效应 (LDA+U)、弱相互作用(DFT-D)
	11:55-13:30	午餐时间(餐后可回宿舍休息或直接去教室上机, 工程师 13:00 开始答疑)
	13:30-17:00	预测基本物性 (II) 能带结构相关之物性预测: 能带结构、态密度、磁性、弹性系数张量、载子的有效质量、绘出费米球面、能带折叠与派洛歧变
	17:00-18:00	工程师答疑时间
第三天 (光谱、能谱预	09:00-11:55	电子能谱: 电子光谱与介电函数、芯电子能谱、NMR 化学位移
	11:55-13:30	午餐时间(餐后可回宿舍休息或直接去教室上机, 工程师 13:00 开始答

测)		疑)
	13:30-17:00	振动能谱：静介电常数与红外线光谱、拉曼光谱；声子谱与声子态密度以及比热
	17:00-18:00	工程师答疑时间
第四天 (表面界面与 掺杂体系)	09:00-11:55	表面与界面的物理与化学现象：表面能带结构与表面态、功函数、表面重构、化学吸附、STM 影像仿真、异质结能带偏移 (band-offset)、二维及层状结构
	11:55-13:30	午餐时间 (餐后可回宿舍休息或直接去教室上机, 工程师 13:00 开始答疑)
	13:30-17:00	缺陷与掺杂：虚拟晶体近似法、超晶胞近似法、非晶材料
	17:00-18:00	工程师答疑时间
第五天 (化学反应、有 限温度、综合讨 论)	09:00-11:40	过渡态搜寻及活化能预测、分子动力学计算、分子激发态(含时密度泛函)
	11:40-13:30	午餐时间
	13:30-17:00	进阶范例综合练习与总复习、个案咨询讨论、实务经验分享
	17:00-17:30	培训班闭幕, 颁发证书

三、讲师简介：

李明宪，台北市人，现居淡水。

- 任教于淡江大学物理系、也在台湾大学材料系兼课、同时为中科院新疆理化技术所之客座研究员。
- 1990 本科毕业于淡江大学，获物理与数学双重学士学位（修业六年）。
- 1991 留学英国卡文迪西实验室，受业于 Volker Heine 教授门下。
- 1995 获剑桥大学博士学位，并释出第一代 CASTEP 赝势数据库

李明宪博士为 Materials Studio CASTEP Pseudopotential 数据库的主要作者，自 1992 起至 2014 发展了四个世代。持续开发材料物性及化学键分析工具 配合 CASTEP 进行材料之线性与非线性光学性质计算。参与 (旧) Cerius2 /CASTEP 超软赝势之开发建构 (与 C. Pickard)，并成为 (旧) Cerius2 / CASTEP 国际发展者俱乐部 (CASTEP International Developer Club)之一员。1998 年前后开始着手规划将 CASTEP 用于本科生及硕士生之固体物理教学，为全亚洲首例。长期受聘在国网中心讲授"NCHC 计算化学 Materials Studio / CASTEP 进阶密集课程"。曾获邀至台积电作 CASTEP 材料计算培训。近年亦受邀至中国科学技术大学材料系，开授第三学期 CASTEP 材料物性计算课程。多年参与台北市高中学生物理资优营，教授数学 (II)、近代物理、计算机模拟实验。偶尔担任初中、高中科学展览评审。

四、资格认证证书：参加培训的学员将获得创腾科技有限公司颁发的培训证书。

五、培训费用：

学员类型	培训费用 (1人参加)	优惠条件
		1、7月15日前汇款 2、同一单位≥2人， 3、或同一学员(2011年-至今)参加过 MS 培训班
教育科研客户	6000/人	5500/人
政府科研/企业客户	9000/人	8200/人

注：统一开据发票内容为“**培训费**”，发票将在培训期间发给学员，若您对发票内容有特殊要求请务必在回执中注明。

收费方式：

a、银行汇款（请在汇款时务必备注参加人员姓名）

户名：北京创腾科技有限公司上海分公司

开户行：招商银行上海晨晖支行

账户：121919707510501

b、现金支付：培训现场可收取现金或刷卡。

六、报名方式：

■ **网站报名**：登录创腾学院网站 <http://training.neotrident.com/>，在线提交或下载**报名回执**提交到 market@neotrident.com。

■ **手机报名**：

识别下面二维码，手机提交报名



注：按照报名先后顺序排座次，每班名额有限，额满为止。

七、培训班联系人：

创腾科技有限公司 市场部

电话：021- 82676188 -219；021- 82676188-233（陈小姐），13916858963

Email：market@neotrident.com

Web：www.neotrident.com



创腾学院
给您进入全球顶尖
研发中心的通行证

登陆“**创腾学院**”网站，获取更多培训课程信息及学习资源