

2017 年量子力学 CASTEP 模块高阶特训课程

——李明宪教授主讲 CASTEP (四日) 专题课

课程时间：2017 年 11 月 20 日-23 日，共四天

课程地点：北京(具体地点待定)

一、讲师介绍

本次 CASTEP 模块高阶特训课程特聘台湾淡江大学李明宪教授全程（四日）授课。

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。

二、课程特色

作为高阶培训，课程侧重与计算性质相关的理论讲解与实践，提高使用者对计算结果的理解与分析能力，增强对于 CASTEP 模块基本原理与参数的理解，从而得到正确且有意义的计算结果。课程紧密联系各领域发表的高水平文献，将理论与实践紧密衔接。同时课程不仅限于 Materials Studio CASTEP 界面已有的功能也加入了文本模式操作下的更多模拟结果信息输出。

三、课程适宜人员

为了您能更好的掌握课程内容，本课程推荐满足以下条件之一的老师同学参加：

- 1、参加过李明宪教授暑期培训；
- 2、参加过创腾科技举办的 CASTEP 培训；
- 3、有至少一年的软件使用经验。

四、培训形式

所有学员每人一台计算机，培训过程中在工程师讲解时，学员上机操作，并有工程师进行现场答疑。

五、报到说明

报到时间：2017年11月19日下午14:00-17:00，11月20日上午8:30-9:00。

报到地点：北京(具体地点待定)

六、课程费用

注册类型	培训费用 (1人参加)	优惠费用:
		优惠条件: 1、同一单位≥2人，可享受优惠； 2、同一学员(2011年-至今)参加过MS培训班，可享受优惠
教育科研客户	4800/人	4000/人
政府科研/企业客户	7200/人	6400/人

特殊优惠：若在10月31日前报名且汇款，可以再享受200元的优惠

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。

七、报名方式

- **报名方式**：登录创腾学院官网 <http://training.neotrident.com/> 在线提交或下载**报名回执**。名额有限，报名从速，额满为止。
- **付费方式**：
 - 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。

八、周边住宿(请学员自行预定,费用自理)

住宿推荐待定中

九、培训班联系人

创腾科技有限公司市场部

电话：021-51821768-219 (叶小姐)

021-51821768-233 (陈小姐), 13916858963

市场部邮箱：market@neotrident.com

培训网站：<http://training.neotrident.com/>

附课程表

创腾科技有限公司材料科学部
2017年8月31日



附件：培训班课程日程安排

第一性原理计算中的数学与数值方法	
20日上午	线性代数与量子力学
	自洽迭代求解原理 (SCF solver)、非自洽 (能带) 迭代以及几何结构优化
	对称性与群论的初步介绍
	傅里叶变换及三维傅里叶变换并行化 (FFT 及 3D FFT)
	CASTEP 新的模组化架构及其优势
赝势理论、生成新的赝势及测试	
20日下午	赝势的基本概念
	模守恒：Kleinman-Bylander (可分离) 形式
	可分离形式的一般化：超软赝势与 PAW 方法
	如何产生与测试 CASTEP 赝势
	如何在文章中引述赝势相关讯息
电子结构分析原理与实践 (能带、态密度、电荷、化学键分析)	
21日上午	从能带中看到化学键 (Hoffman and Heine view)
	带隙的两种起源
	直接能隙与间接能隙的判别
	杂质能级、费米面与参考位势；如何寻找参考位势
	磁性、旋轨耦合、非共线磁性
	Wannier 函数是什么？
21日下午	原子轨道线性组合 (LCAO)：它为何可行？
	Mulliken 布居分析理论 (含磁性布局分析)、键级
	如何将原本简并的轨道进一步分解与指认 (dxy , dyz , dzx 等) / 画出不同 d 轨道的投影态密度
	理论：双粒子密度分布函：电子局域函数(ELF)
	孤立电子判定方法，Hirshfeld 电荷分析
	Bader 的量子原子理论及电荷密度分析方法
固体与表面上的复杂过程—吸附、扩散、迁移、反应等	
22日上午	二维材料布里渊区选取及表面态
	化学吸附与吸附后功函数改变
	极化表面的修正
	差分电子密度
	非均相催化：过渡态搜索+区分函数计算 (预测反应动力与温度的关系)
22日下午	固体中掺杂与缺陷的处理
	固体材料中如电池结构中的离子扩散：过渡态搜索+过渡态确认
	锂电池中的放电曲线：电流-电压关系

	结构稳定性与声子软模
	材料的硬度：应变、应力与断裂
物质与电磁场的交互作用	
23 日上午	材料的光学性质：电子跃迁效应
	理论：晶体光学（何谓光轴）
	介电张量
	双折射率
	如何使用开源软件 OptaDOS
	非线性光学性质计算的方法
23 日下午	材料的光学性质：晶格振动效应
	理论：简正模式（normal modes）与群表象理论
	红外吸收与拉曼散射谱
	拉曼活性模式与计算振动频率的对应关系即拉曼光谱的点群标记（群表象的应用）
	点声子振动 Γ 如何以 Jmol 程序查看非
	综合讨论答疑时间