

2023 第一原理材料計算初階課程

Summer school on First Principles Computational Materials Research- Introductory Level

- ▶ 日期：2023年6月26日至6月27日(10:00-17:00)
- ▶ 地點：國立清華大學(新竹市光復路二段101號)
 - 課堂講授地點：物理館1F, R124教室
 - 電腦教室實習地點：綜二館2F, 計算機與通訊中心, 電腦教室II, 電腦教室III

Jun.
26-27

10:00 am-17:00 pm

課前預習6/12-6/15 實體課程6/26-6/27 作業繳交6/26-7/16

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。學習時程有三階段，請學員於6/12-6/15自行觀看完課程錄影與程式計算的練習。實體課程分兩梯次於6/26與6/27進行，錄取學員需於當天抵達現場，當日可與老師討論預習與實作課程所發生的任何問題。實體課程結束後須完成指定作業，請學員於6/26-7/16繳交以利審核學習狀況，通過學員具備報名進階課程的資格。

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2023年6月26日至27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：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。

對象：全國各大專院校相關系所同學及相關研究人員。主辦單位審核後將公告錄取名單。
(第一梯次:6/26; 第二梯次:6/27)

保證金：除教授/老師外，學生及博後均需預繳保證金1,000元。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科技部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。

報名時間：2023年5月18日截止。

報名方式：完成線上報名，並郵寄/Email 報名審查資料。

報名審查資料：200字參加動機與未來研究規劃、推薦教授簽名、歷年成績單。
(已通過博士班資格考者僅需附上通過證明)

[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(cygwin)，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。

聯絡人：Ms. Renee Ho, 何小姐

地址：300044 新竹市光復路二段101號
國家理論科學研究中心NTHU Hub

電話：03-5742256

E-mail：renee@phys.ncts.ntu.edu.tw

主辦單位：國家理論科學研究中心

協辦單位：國家高速網路與計算中心



報名截止:2023年 5月18日



NAR Labs 國家實驗研究院
National Applied Research Laboratories

國立清華大學
NATIONAL TSING HUA UNIVERSITY

NCTS