

2025 First Principles Computational Materials Research

Introductory Level

June 23-24. 10 a.m. TO 5 p.m.

2025 第一原理材料計算初階課程

Venue: National Tsing Hua University

報名開始

4/21 ~ 5/12

課程簡介

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2025年6月23日至24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

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: 6/23; 第二梯次: 6/24)

報名相關

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。



報名日期: 2025年5月12日截止。

報名方式: 完成線上報名，並以Email報名審查資料。

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)

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B1, R019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/NY4Vom>

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

學習時程有三階段，請學員於6/7-6/22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6/23與6/24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6/23-7/13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。

課前預習
6/7-6/22

實體課程
6/23-6/24

作業繳交
6/23-7/13

進階課程
8/4-8/8

[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。

報名截止
2025年5月12日

