

Materials Studio 分子模拟软件培训班 ——CASTEP 暑期特训班通知

培训时间：2019 年 8 月 4-8 日（周日至周四，5 天）

培训主题：2019 年 CASTEP 暑期特训班

特邀讲师：李明宪教授，台湾淡江大学

培训地点：北京林业大学

▶双班优享活动：

1) 8 月 CASTEP 暑期特训班（5 天集训，从入门到精通课程，注重实操，轻松上手）

11 月 CASTEP 高阶培训班（5 天集训，高级课程，从计算到结果分析，结合各领域高水平文献）

2) 同时报名以上两个课程可享受直降 **1000-1500 元** 的优惠，详细规则见“费用说明”。

一、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物理人才培育计划，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、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 是由剑桥卡文迪西实验室凝聚态理论组在 1990 年代初期开发，后由 CDG (www.castep.org) 持续发展的一款基



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、化学化工以及能源等领域中的各类问题。

三、培训形式

培训过程中在工程师讲解时，所有学员能够上机操作，并有工程师进行现场答疑。

四、报到说明

报到时间：8月4日（周日）上午 8:00-9:00

报到地点：北京林业大学

五、培训费用

培训费用 (1人参加)	优惠条件（满足任一条件即可）
6500 元/人	1、7月20日前汇款 2、同一单位≥2人参加 3、同一学员之前（2011年至今）参加过 MS 培训班。
	5800 元/人
* 双班优享活动： 1、同时报名本班和 11 月 CASTEP 高阶培训，可享受两个班总价直降 1000-1500 元 的优惠，仅限同一人。 2、缴费规则： 1) 一次性缴纳两班费用，最低优惠价格为 10100 元（直降 1500 元） 2) 分别缴纳费用，8 月课程最低优惠价格 5800 元；11 月课程最低优惠价格 4800 元（直降 1000 元） 注：CASTEP 高阶培训时间为 11 月 11-15 日，课程安排详见 11 月 CASTEP 高阶培训通知	

注：1、培训费包含听课费、资料费、上机费、午餐。住宿和交通费自理。

2、收到您的报名费后，我们会将 PDF 版本 Materials Studio 基本操作教程通过邮件发给您。

3、培训发票为电子发票，学员缴费后现场扫码填写发票信息，发票发送到学员邮箱，发票内容为“培训费”或“会议费”。

4、本次培训不提供增值税专用发票，统一开增值税普通发票。

●**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。北京暑期特训班共招收学员 **50** 人。

●**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：苏州创腾数据科技有限公司（行号：308305008189）

开户行：招商银行苏州分行营业部

账 户：512907942610802

b、现金支付：培训现场可收取现金或刷卡。



六、交通路线

培训地址：北京林业大学

培训地址：北京市海淀区清华东路 35 号

交通路线参考：

• 北京南站

1、【北京南站（C 南口）】上车乘坐地铁 4 号线大兴线（安河桥北方向），【中关村站（C1 东南口）】下车，步行 134 米，【中关村南站】上车，乘坐 355 路公交车（育新小区方向），【北京林业大学站】下车，步行 492 米到达，全程约为 1 小时 16 分钟。

2、打车最短距离为 18.9 公里，全程约需要 55 元。

• 北京西站

1、【北京西站】上车，乘坐 387 路公交（慧忠路东口方向），【蓟门桥东站】下车，步行 370 米，【蓟门桥站】上车，乘坐 438 路公交（永丰公交场站方向），【北京林业大学站】下车，步行 353 米到达，全程约为 1 小时 19 分钟。

2、打车最短距离约为 15.4 公里，全程约需要 42 元。

• 北京站

1、【北京站（D 南口）】上车，乘坐地铁 2 号线（建国门方向），【雍和宫站】下车，换乘地铁 5 号线（天通苑北方向），【大屯路东站】下车，换乘地铁 15 号线（清华东路西口方向），【清华东路西口站（B 东北口）】下车，步行 816 米到达，全程约为 1 小时 5 分钟。

2、打车最短距离约为 19.6 公里，全程约需要 68 元。

七、周边住宿(请学员自行预定，费用自理)

1) 宾馆名称：7 天酒店清华大学东门店 010-85368080

宾馆地址：北京市海淀区双清路 14 号院

2) 宾馆名称：汉庭酒店（清华东门店） 010-62313232

宾馆地址：北京市海淀区王庄路 27 号（城建四公司）

3) 宾馆名称：如家快捷酒店北京清华大学东门店 010-82411980

宾馆地址：北京市海淀区双清路 16 号

注：以上三个经济型酒店供学员参考。暑期周边住宿非常紧张，请学员提早预定住宿。

八、培训联系人

创腾科技有限公司 市场部

电话：0512-67509707-220（叶小姐），021-51821768-233（陈小姐），13916858963

Email：market@neotrident.com；培训网站：<http://training.neotrident.com>



附：培训课程安排

日 期	时 间	培 训 内 容
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：北京林业大学
	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
第二天 (能带结构的理论 与能带结构相关之 基本物性)	17:00-18:00	工程师答疑时间
	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)、弱交互作用 (DFT-D)、旋轨耦合
	11:55-13:30	午餐时间 (餐后可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、直接带隙与间接带隙
第三天 (光谱、能谱预测 与晶格振动)	17:00-18:00	工程师答疑时间
	09:00-11:55	电子能谱: 电子光谱与介电函数、有色金属: 为何金黄银白、芯电子能谱(EELS / ELNES)、NMR 化学位移
	11:55-13:30	午餐时间 (餐后可休息或直接去教室上机, 工程师 13:00 开始答疑)



	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、晶体声速与导热、虚频与结构不稳定性、自由能以及比热
	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、表面超胞偶极修正、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

