

## 2020 年 CASTEP 高级培训班

### ——CASTEP 在固体材料设计，表面吸附及反应，界面研究中的应用

课程时间：2020 年 3 月 24-27 日 (周二~周五)，共四天

课程地点：**在线授课**

#### 一、培训主旨

本次高级培训班课程涵盖复杂模型搭建；CASTEP 参数意义、设置技巧及注意事项；CASTEP 在固体材料及其表面、界面研究中的热点问题。培训本着“理论结合实践、学以致用”的原则，利用创腾科技苏州培训中心提供的软硬件环境，为广大学员提供分子模拟计算的深入体验。

#### 二、培训对象

CASTEP 培训班以复杂模型搭建、深层次的软件应用为核心，主要针对已初步掌握软件操作，以及想进一步提高软件使用水平的科研人员。

#### 三、培训形式

培训将以已发表研究工作为基础，由工程师带领所有学员重复其中的重要步骤，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、培训时间

2020 年 3 月 24~27 日 9:00~12:00 & 13:30~18:00。

#### 五、课程费用

**由于疫情影响，本次课程改为线上直播，并下调 600 元费用。**

培训费用 (1 人参加)	优惠条件 (满足任一条件即可)
3600/人	1、同一单位≥2 人参加。 2、同一学员之前 (2011 年至今) 参加过 MS 培训班。
	3000/人

- 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。

#### 六、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：苏州创腾数据科技有限公司

开户行：招商银行苏州分行

账户：512907942610802

b、现金支付：培训现场可收取现金或刷卡。

## 七、培训班联系人

创腾科技有限公司市场部

电话：0512-67509707-220(叶小姐)，18761873335

021-58353866-233 (陈小姐)，13916858963

Email: [market@neotrident.com](mailto:market@neotrident.com)

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



附：培训班课程安排。

日期	时间	第一部分：固体材料体系的零维到三维多样模型搭建	
		Visualizer 界面	内容
第一天	09:00-10:00	晶体模型及缺陷 掺杂模型的搭建	<ul style="list-style-type: none"> <li>完美晶体结构及掺杂取代空位结构的搭建；</li> <li>构建缺陷晶胞的方法：Redefine lattice 方法，切表面方法；</li> <li>枚举合金结构；</li> </ul>
	10:00-10:30	<b>休息及在线讨论答疑</b>	
	10:30-11:30	表面及表面吸附 模型搭建	<ul style="list-style-type: none"> <li>表面模型的搭建方法，带根号表面模型搭建方法；</li> <li>表面形状和大小控制：表面矢量调整</li> <li>表面吸附分子空间位置的精确控制；</li> </ul>



	11:30-12:00	<b>在线讨论答疑</b>	
	12:00-14:00	<b>午休</b>	
	14:00-14:30	界面模型搭建	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 异质结模型搭建</li> <li>• 孪晶模型搭建</li> </ul>
	14:30-15:00	纳米材料模型搭建及其他	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 纳米管、纳米线、石墨烯的搭建方法；</li> <li>• 结构文件的多种格式的输出和图表文件的后处理方法</li> <li>• 客户端和服务器的连接设置及联通问题解决办法等</li> </ul>
	15:00-15:30	<b>休息及在线讨论答疑</b>	
		<b>第二部分 CASTEP 模块的基本原理及参数意义</b>	
		<b>CASTEP 模块</b>	<b>内容</b>
	15:30-16:30	CASTEP 的整体架构和其中的假设	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 密度泛函理论</li> <li>• Kohn-Sham 方程</li> <li>• 自洽迭代求解</li> <li>• 交换相关泛函</li> <li>• 赝势</li> </ul>
	16:30-17:00	<b>在线讨论及答疑</b>	
<b>日期</b>	<b>时间</b>	<b>第二部分 CASTEP 模块的基本原理及参数意义</b>	
		<b>CASTEP 模块</b>	<b>内容</b>
<b>第二天</b>	09:00-10:00	CASTEP 的参数及其意义	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 动能截断及测试</li> <li>• K 点取样意义及测试</li> <li>• 自旋极化设置</li> <li>• DFT-D</li> <li>• Fix Occupancy、Smearing</li> <li>• 偶极修正 (Dipole Correction)</li> <li>• 几种空带的选取</li> </ul>
	10:00-10:30	<b>休息及在线讨论答疑</b>	
		<b>第三部分 CASTEP 在固体材料结构设计及电子性质研究中的应用</b>	
	10:30-11:30	结构优化及相关问题	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 结构优化和自洽迭代失败的常见问题处理；</li> <li>• 结构优化是否以 P1 对称性结构开始；</li> <li>• 结构优化中晶胞参数和原子位置的约束优化；</li> <li>• 设计结构的稳定性判定：能量稳定性（形成能、内聚能、能量的扩展应用）；动力学稳定性（声子）；机械稳定性</li> </ul>
	11:30-12:00	<b>在线讨论答疑</b>	
	12:00-14:00	<b>午休</b>	
	14:00-15:00	固体材料性质研究	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 电子云图处理；电荷电子转移、化学键布居分析。</li> <li>• CASTEP 对能带的处理；费米面、价带顶、导带底的位置</li> </ul>
	15:00-15:30	<b>休息及在线讨论答疑</b>	



	15:30-16:30	固体材料性质研究	<ul style="list-style-type: none"> <li>能带路径的调控</li> <li>准确能带结构的获取方法: 加 U 修正、杂化泛函的选取及意义、HSE 泛函的参数的编辑</li> </ul>
	16:30-17:00	<b>在线讨论答疑</b>	
<b>日期</b>	<b>时间</b>	<b>第四部分: CASTEP 在二维纳米材料研究中的应用</b>	
		<b>CASTEP 模块</b>	<b>内容</b>
<b>第三天</b>	09:00-10:00	二维纳米材料相关研究	<ul style="list-style-type: none"> <li>二维纳米材料相关研究案例介绍</li> <li>载流子有效质量的计算</li> </ul>
	10:00-10:30	<b>休息及在线讨论答疑</b>	
	10:30-11:30	二维纳米材料相关研究	<ul style="list-style-type: none"> <li>载流子迁移率的相关理论与计算</li> </ul>
	11:30-12:00	<b>在线讨论答疑</b>	
	12:00-14:00	<b>午休</b>	
		<b>第五部分: CASTEP 在界面研究中的应用</b>	
	14:00-15:00	界面结构相关研究	<ul style="list-style-type: none"> <li>界面相关研究案例介绍</li> <li>半导体异质结相关理论介绍</li> <li>同型异质结 (P-p 结或 N-n 结)、异型异质(P-n 或 p-N 结)</li> </ul>
	15:00-15:30	<b>休息及在线讨论答疑</b>	
	15:30-16:30	界面结构相关研究	<ul style="list-style-type: none"> <li>异质结结构能带结构及能带偏移的计算</li> </ul>
	16:30-17:00	<b>在线讨论答疑</b>	
<b>日期</b>	<b>时间</b>	<b>第六部分: CASTEP 在材料表面研究中的应用</b>	
		<b>CASTEP 模块</b>	<b>内容</b>
<b>第四天</b>	09:00-10:00	表面结构设计和计算注意事项	<ul style="list-style-type: none"> <li>表面相关案例介绍</li> <li>吸附基底层数、真空层厚度、终端原子的选取</li> <li>吸附面选取、吸附位、吸附空间构型的确认</li> <li>晶面指数转换、表面能(符合化学计量比和不符合化学计量比的计算方法)和吸附能相关计算</li> <li>表面结构计算时参数设置注意事项</li> </ul>
	10:00-10:30	<b>休息及在线讨论答疑</b>	
	10:30-11:30	表面化学反应相关研究(一)	<ul style="list-style-type: none"> <li>过渡态理论介绍</li> <li>过渡态搜索及确认</li> <li>表面化学反应研究中注意事项</li> </ul>
	11:30-12:00	<b>在线讨论答疑</b>	
	12:00-14:00	<b>午休</b>	
	14:00-15:00	表面化学反应相关研究(二)	<ul style="list-style-type: none"> <li>表面化学反应动力学相关理论介绍</li> <li>反应速率随温度的变化、平衡常数、活化能计算方法</li> </ul>



15:00-17:00

在线讨论答疑

Driven  
Innovation  
Quality

北京创腾科技有限公司 | 北京·上海·苏州·广州  
www.neotrident.com  
苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301  
电话: (0512) 67509707

