

Materials Studio 分子模拟软件培训班

——李明宪教授 CASTEP 暑期拓展班通知

培训时间：2020 年 9 月 7-11 日（周一至周五）

培训主题：「学理延伸 案例导览」的 CASTEP 拓展班

特邀讲师：李明宪教授，台湾淡江大学

培训地点：在线培训（课程结束后开放回看）

回看规则：专精班和拓展班课程全部结束后，我们将于 9 月 14-18 日开放专精班回看，回看时间段和课程表中上课时间相同，共五天；9 月 21-25 日开放拓展班回看，回看时间和课程表中上课时间相同，共五天。请大家自行安排好观看回放时间。

双班优享活动：

- 1) 9 月 CASTEP 暑期专精班（5 天集训，功能盘点 经验传承 交待透晰 实力助增）
- 2) 9 月 CASTEP 暑期拓展班（5 天集训，铺陈文献 理说从头 善用外挂 困境刃解）
- 3) 同时报名以上两个课程可享受直降 **1000 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、课程特色

作为拓展班，本班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

本课程将不包含 CASTEP 专精班五日课程的内容，因此建议已参加过 CASTEP 五日专精班特训者参加。

四、培训形式

在线授课，培训过程中在工程师讲解时，学员上机操作，并有工程师进行在线答疑。

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)
5500 元/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。
	5000 元/人
* 双班优享活动: 同时报名本班和 9 月 CASTEP 专精班，可享受两个班总价直降 1000 元 的优惠，仅限同一人。 1、同时报名本班和 9 月 CASTEP 专精班的老学员参加 (参加过 2020 年 8 月 31 日前 MS 培训)：双班总价为 9000 元/人 (直降 1000 元) 2、第一次参加的学员，双班最低优惠价格：10000 元/人 (直降 1000 元) 注：CASTEP 专精班培训时间为 8 月 31 日-9 月 4 日，课程安排详见 9 月 CASTEP 专精班培训通知。	

注：1、培训费包含**邮寄纸质版教材**的费用。

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：**

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



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），
021-51821768-233（陈小姐），13916858963

Email: market@neotrident.com

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



附：培训班课程安排。



数学、数值、大数据（兼论功能与效能的调校）	
第一性原理材料计算中的数学与数值方法	
7 日上午	线性代数与量子力学
	自洽场迭代求解原理（SCF-Solver）、非自洽(能带)迭代、以及几何结构优化
	对称性与群论如何用在第一性原理计算
	傅里叶变换及并行化三维傅里叶变换（FFT and Parallel 3D FFT）
	CASTEP 的模组化架构
材料基因体简介与结构搜寻	
7 日下午	材料的基因体是什么意思？
	以第一原理总能拟合模型参数
	第一原理随机结构搜寻（开源程式）：AIRSS
	纯碳结构 AIRSS 演练的模型分析与准备
	材料信息学简介
交换关联电子与空心原子的近似理论	
电子无两样：普世泛函勤寻觅	
8 日上午	Slater 行列式与 Hartree-Fock 方法
	多电子交互作用的 Vxc 简化：LDA/GGA、non-local(hybrid) X (PBE0, sX-LDA, HSE)、能隙问题、U、D、TD-DFT
	元素有差别：以假乱真是化学
	赝势的观念与各种理论
	模守恒条件；KB (可分离) 形式
	可分离 型式的一般化；超软赝势与 PAW 方法
	鍊金师赝势简介
赝势的产生、测试与妥适运用	
8 日下午	如何产生与测试 CASTEP 赝势（OPIUM、OTFG）
	与赝势有关的修正与策略（非线性核修正、光学跃迁矩阵、虚晶近似、鍊金师赝势）
	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、电荷分佈、化学键分析）	
能带及其衍生的性质	
9 日上午	在能带里看到化学键、金属键是什麼？
	带隙的三种起源：原子能级与布拉格反射、自发对称破坏、Mott 金属-绝缘体 转变



	直接能隙与间接能隙的判别
	费米能级值、杂质能级与如何找寻参考位势、不同的能级排比方式
	磁性、旋-轨耦合、非共线磁性
化学键与电子密度相关特性	
9 日下午	原子轨道的线性组合(LCAO): 它为何可行?
	理论: Mulliken 佈居分析 (含磁性 佈居分析)、键级
	将简并原子轨道进一步分解指认 (d_{xy} , d_{yz} 等) / 画出不同 d 轨道的投影态密度
	理论: 双粒子密度分佈函: 电子局域化函数 (ELF)
	孤立电子判定方法, Hershfield 电荷
	Bader 量子原子理论及电荷密度分析方法
固体内与表面上的複杂过程	
表面的物理性质与化学反应	
10 日上午	二维布里渊区与表面态
	化学吸附与功函数改变
	极化表面的修正
	差异(差分)电子密度及其作圖
	非均相催化: 反应活化能、过渡态搜寻+区分函数计算 (反应动力与温度的关系)
固体内的杂质、扩散、结构稳定性与硬度	
10 日下午	掺杂与缺陷的处理
	固体中的离子扩散: 过渡态搜寻 + 过渡态确认
	锂电池的放电曲线: 电量-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	
材料的光学性质: 电子跃迁效应	
11 日上午	理论: 晶体光学 (何谓光轴、折射率椭球)
	介电张量
	双折射率
	如何使用 开源软体 OptaDOS
	非线性光学性质计算的方法
材料的光学性质: 晶格振动效应	
11 日下午	理论: 简正模式 (normal modes) 与 群表象理论
	红外吸收与拉曼散射谱
	如何使用 Jmol 观看非 Γ 点声子的長波長振动
	Born 有效电荷
	研究情境问题综合讨论



专题自由讨论

AI
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

