

Materials Studio 分子模拟软件培训班

——李明宪教授 CASTEP 暑期专精班通知

培训时间：2020 年 8 月 31-9 月 4 日（周一至周五，5 天）

培训主题：「概念密技 全面精通」的 CASTEP 专精班

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 困境刀解）
- 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

Neo

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

本次专精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

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。

四、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。
* 双班优享活动： 同时报名本班和 9 月 CASTEP 拓展班，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 拓展班的老学员报名 (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 拓展班培训时间为 9 月 7-11 日，课程安排详见 9 月 CASTEP 拓展班培训通知。	

- 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。

五、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

六、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)	08:30-09:00	在线登录
	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
	11:40-13:30	午餐时间
	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
	17:00-18:00	工程师答疑时间
第二天 (能带结构的理论与能带结构相关之基本物性)	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
	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、能带折叠与派洛岐变、直接带隙与间接带隙
	17:00-18:00	工程师答疑时间
第三天 (光谱、能谱预测与晶格振动)	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



	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
	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	工程师答疑时间

