

“第一性原理-固体材料性能计算”培训通知

1. 主题背景和培训必要性

无论是实际材料研究,还是论文发表过程中,基于第一性原理(密度泛函理论,DFT)的材料性能计算工作越来越普遍,(一般来讲)也是高质量研究工作的重要组成部分。得益于广大理论和计算工作者的多年的辛勤劳动,目前材料性能计算相关的理论,软件和硬件都处于高速发展的辉煌时期。用于分子(没有结构周期性)材料计算的软件主要以 Gaussian 为代表;而用于固体材料(具有结构周期性)性能计算的软件则较多,如: Materials studio (MS), VASP, ABINIT, pwscf (QE), WIEN2K, ADF, CRYSTAL 等,以及基于这些软件计算结果的后处理程序,如 phonopy, BoltzTrap, ShengBTE, wannier,等。这些软件各有特点,但计算思路差不多,即:输入结构模型->设置计算参数->运行->查看计算结果。固体材料性能种类众多,主要包括:光学、电学、磁性、热学、力学(机械性能)以及各种输运性能等。在 DFT 理论框架下,原则上这些性能都可采用上述软件进行计算。

考虑到材料领域众多研究者不精于 DFT 理论,但又需要进行相关的计算工作。本培训将主要通过几个代表性的第一性计算软件包括 MS(主要是 CASTEP 模块), VASP, ABINIT, 以及后处理软件 phonopy, BoltzTrap, ShengBTE 等对材料多种性能(包括但不限于:材料能带结构,态密度,介电、压电、铁电、线性和非线性光学,共线和非共线磁性,热、电输运性能等)的实例计算培训,提高学员对固体材料性能计算过程的整体把握,为以后能独立开展相关计算工作打好基础。本培训将弱化 DFT 的理论细节,侧重于材料具体性能计算结果的获得。

本培训选择 MS, VASP, ABINIT 作为主要计算工具的理由:在所有第一性计算软件中这三个软件都是发展历史比较悠久,功能比较强大,用户群体比较广,而且计算量性价比较高的;另外,MS 集建模与计算于一体,界面友好,容易上手;VASP 计算结果认可度较高;ABINIT 开源免费。

2. 培训主要内容

- 1) 理论及方法讲解: DFT 和后 DFT 理论框架和计算方法概述;
- 2) 实例讲解和实践训练:通过 MS 讲解材料结构建模方法;
- 3) 实例讲解和实践训练:通过 MS, VASP, ABINIT 和 phonopy, BoltzTrap, ShengBTE 等

对实际材料性能（包括但不限于能带结构，态密度，介电、压电、铁电、线性和非线性光学，共线和非共线磁性，热、电输运性能等）进行计算，让学员系统性的掌握固体材料性能的计算方法和过程。

3. 与本培训有关的学科和研究领域

晶体学、材料、物理、化学学科中凡与材料计算有关的研究领域

4. 培训老师介绍

姜老师：中科院福建物构所博士，南京大学博士后，德国慕尼黑工业大学博士后，对 MS, VASP 和 ABINIT 均有超过十年的使用经验，发表中科院一区和二区论文共 40 余篇（含合作）。

5. 培训日程表

注：

1. 根据学员实际需求，实际培训的具体内容可能有少许变动。
2. 学员需自带笔记本电脑（Windows 7 或以上系统，内存>4G，磁盘最好>50G）。

第一天 上午：DFT 理论及结构建模方法概述； 下午：MS	8:30-9:00	学员注册报到，领取培训资料，软件安装与计算环境部署
	9:00-10:30	DFT 理论框架与第一性计算方法概述
	10:30-10:50	茶歇与讨论
	10:50-12:00	材料结构模型构建方法讲解
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:40	实例操作与讲解：MS 软件及各建模介绍
	15:40-16:00	茶歇与讨论
	16:00-17:40	实例操作与讲解：MS 结构建模方法
	17:40-18:00	茶歇与讨论
第二天 上午：MS 下午：VASP	8:30-10:00	实例操作与讲解：MS 计算能带，态密度等
	10:00-10:20	茶歇与讨论
	10:20-11:40	实例操作与讲解：MS 计算介电、线性光学性质等

	11:40-12:00	茶歇与讨论
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:40	实例操作与讲解: VASP 软件功能及计算流程
	15:40-16:00	茶歇与讨论
	16:00-17:40	实例操作与讲解: VASP 计算线性和非共线磁性 (自旋极化, LDA+U, LDA+U+SOC) 等
	17:40-18:00	茶歇与讨论
第三天 上午: VASP 下午: ABINIT	8:30-10:00	实例操作与讲解: VASP 其它 (高阶) 功能 1: ELF, 高精度 HSE06, GW 能带计算等
	10:00-10:20	茶歇与讨论
	10:20-11:40	实例操作与讲解: VASP 其它 (高阶) 功能 2: vdW-DF, Berry Phase 计算铁电极化等
	11:40-12:00	茶歇与讨论
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:40	实例操作与讲解: ABINIT 软件功能及计算流程
	15:40-16:00	茶歇与讨论
	16:00-17:40	实例操作与讲解: ABINIT 计算线性和非线性光学、压电等
	17:40-18:00	茶歇与讨论
第四天 MS, VASP, ABINIT 总结; phonopy, BoltzTrap, ShengBTE	8:30-10:00	实例操作与讲解: MS, VASP, ABINIT 中部分功能的补充讲解
	10:00-10:20	茶歇与讨论
	10:20-11:40	实例操作与讲解: phonopy 计算声子谱, 力常数, Gruneisen 参数等
	11:40-12:00	茶歇与讨论
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:40	实例操作与讲解: BoltzTrap 计算电子热导, 电导等
	15:40-16:00	茶歇与讨论



	16:00-17:40	实例操作与讲解: ShengBTE 计算比热, 热导等
	17:40-18:00	茶歇与讨论
	培训结束	

6. 培训时间/地点

时间: 2019年8月1-4日(四整天)

地点: 福州市(详细地点见邮件通知)

7. 培训费用

RMB 4900(包括培训费、午餐费, 不包含差旅及住宿费), 限28人;

报名费可现场支付, 若2019年7月20日前付款则只需支付RMB 4600。

8. 汇款账户

账户名: 福州水草云信息咨询有限公司

账户: 1402029109601062247

开户行: 中国工商银行福州洪山支行

9. 报名参加

填写报名表(见下页), 并发送到邮箱: service@shuicaoyun.com

或通过网站提交报名: www.shuicaoyun.com

10. 联系方式

Mobile: 15205019786 赵女士

Email: service@shuicaoyun.com



报名信息表

培训主题：第一性原理-固体材料性能计算			
学员信息			
姓名*		单位*	
邮箱*		电话*	
支付培训费*	银行转账, or 现场支付	发票抬头*	
学员类别	研究生, 老师, 公司职员, or 其它人员	从事的研究 方向	

注：*为必填项，请在网上填报（建议）<http://www.shuicaooyun.com/index/pxggxj/id/36.htm>

或将此表发送到邮箱： service@shuicaooyun.com