

2012第一原理材料計算初階課程

April 28-29, 2012

您好，

首先謹代表國家理論科學中心材料計算研究小組(CMRFG)歡迎大家參加本課程。本課程的目標是希望能透過此兩天的課程，讓大家瞭解第一原理材料計算的理論及其應用。為了更有效的利用這二天，我們希望大家能在上課前做一些作業。這包括兩部分，第一部分是希望學員能先熟識一下 Unix 環境的一些指令，及在 Unix 環境編寫資料檔案的能力(vi 編輯器)。因為本課程的實習課是在國高的 IBM 高速工作站，是 Unix 的工作環境。過去的經驗告訴我，如果你完全未用過 Unix 的指令及其 vi 編輯器，你將很難跟上進度，希望學員一定要預先作練習。我們提供了 Unix 指令的簡介，以及 vi 編輯器的介紹(請參閱網站中的 13&14-unix.pdf 為其講義；13-unix.exe、14-fortran.exe 則為其課程錄影)。歡迎學員下載收看，並作適度之練習。

學員可以到以下的網站下載相關的資料：

<http://www.ncts.ncku.edu.tw/phys/cmr/070421/class1.htm>

我們也提供如何在個人電腦 window 環境建立 Unix 平台的方法，可參閱網頁中的 cygwin.pdf，此檔案描述如何網路下載 cygwin 的程式，安裝的過程，及使用的方法。Cygwin 提供在 window 環境建立 x-term 視窗的環境，學員可以在此視窗作 Unix 指令的練習(注意：要裝完整的 cygwin 程式至少需要 3.5~4 G 的磁碟空間)，cygwin 內建 Fortran 77 及 xmgrace，其中 xmgrace 為一相當好用之免費專業作圖軟體，本課程的能帶圖、態密度圖皆是使用此軟體。cygwin.pdf 也對 xcrysdn、mercury、xmgrace 的安裝及使用作詳細之描述。若在安裝或使用上有任何問題請與 Amy 聯絡。

第二部分則是晶體結構與能帶理論的相關知識，可參閱網頁中的教材講義：1-crystal-structure.pdf, 2-bloch1.pdf, 3-bloch2.pdf, 課程錄影：1-crystal-structure.exe, 2-bloch1.exe, 3-bloch2.exe, 學員可先參閱講義，有需要時才下載課程錄影觀看。如果尚有不明白的地方，可利用上課當天之休息時間，或實習課時再問我。有時間的話，可多預習 LDA 及 Surface 的部分。現場會發講義。exe 為執行檔，你只要在 Window 的視窗下雙按此檔案便可觀看其內容，此時右下方有一個小視窗如下方之左圖，你可把滑鼠游標移至視窗內的任一位置(如下方之右圖)以便跳到此區域開始播放。



上課錄影是我上課的現況錄影。有一些亂，請多包涵。本課程會要求學員做一些作業，學員可於上課期間，或課後兩個星期內完成，學員上課時所使用的帳號可使用到課後兩個星期。我們將於暑假期間舉辦進階學程，申請參加進階學程者需附初階課程之作業。

若有任何問題，請與理論中心的 Amy 聯絡，謝謝！

祝一切順利！

中正大學物理系

梁贊全 2012 年 3 月 30 日

參考書: 1. Electronic Structure : Basic Theory and Practical Methods by Richard M. Martin (Cambridge University Press) 2004

2. 固體能帶理論，主編：謝希德與陸棟，復上大學出版社 1998