

2012 Summer School on First-principles Computational Materials Research -Advance Level

2012第一原理材料計算進階課程

July 23-27, 2012

成功大學國家理論科學研究中心及計算機中心

報名截止：2012年6月10日

基本資料 Identification:

姓名：_____ 學校系所單位：_____ 性別：男；女。

職稱：教授/老師； 博士後； 博士生； 碩士生； 大學生； 其他_____

博士後研究員及學生等，請務必請您的指導教授簽名(及 E-Mail)：

指導教授姓名：_____ 電話：_____ E-mail：_____

指導教授簽名 Signature：_____ ※ (報名時，請務必附上指導教授簽名)

行動電話：_____ E-mail：_____ (※請填可收通知信之信箱)

住宿安排 Room Reservation : (提供 7/23 ~ 7/26 夜共 4 夜為主，住成大學生宿舍、招待所、光華飯店等。)

Type： 住宿日期從 7 月 _____ 日至 _____ 日，共 _____ 夜。(前一夜 7/22 只提供給遠程地區學員住宿)

成大學生宿舍：希望之室友 1. _____、 2. _____。

(學生宿舍無寢具、無網路。住宿者請自備個人清潔及盥洗用品、寢具或睡袋等。我們會儘量依你填寫之優先次序安排住宿之室友，中心將補助全程參與的學生及博士後之住宿。

若您無特別指定室友，則將由中心為您安排；住宿安排以學生宿舍三人房為主。)

迎賓苑招待所 光華飯店 其他 _____。

(參加課程的老師或研究員，將安排住在迎賓苑招待所或光華飯店為主，並依報名繳款順序來預留房間)

餐點 Meal：7/23 素午餐；7/24 素午餐；7/25 素午餐；7/26 素午餐；7/27 素午餐；

7/23 葷午餐；7/24 葷午餐；7/25 葷午餐；7/26 葷午餐；7/27 葷午餐；

繳交保證金 Pay the deposit : 請填入匯款資料。

※ 參加者除「教授/老師」外，請一律需繳交『保證金』1,000 元，除曠課外，將於結束後全額退還保證金。

匯入銀行：017 兆豐國際商業銀行(新竹分行) 匯入戶名：何小剛 匯入帳號：203-10-471203

繳款日期：_____ 繳款人銀行/郵局帳號：_____

繳款金額：_____ 繳款人名單：_____

※ 請務必填寫上述資料，以便核對匯入金額，謝謝！

經費補助 Financial support : 全程參與課程，未曠課者、跨縣市之學員，才提供補助。

住宿補助 (由中心安排住宿之部份補助)

交通補助 由 _____ 到 台南 (成大) 車種 _____ 車資共 _____ 元

PS：交通補助需憑票根，由學校單位至中心之車資，以「自強號」為上限。

聯絡資訊： Ms. Fu 傅小姐 (國家理論科學研究中心)

電話: 06-2757575 ext. 65081; 傳真: 06-2373981; E-mail: cmr@phys.cts.nthu.edu.tw

郵寄地址：701 台南市東區大學路 1 號 成功大學國家理論科學研究中心

<http://www.ncts.ncku.edu.tw/phys/cmr/120723>

接下頁

2012 Summer School on First-principles Computational Materials Research -Advance Level

2012第一原理材料計算進階課程

July 23-27, 2012

成功大學國家理論科學研究中心及計算機中心

曾否參加初階課程：是；否

若電腦室之電腦不足時，可否自備手提電腦：是；否

所屬研究室是否擁有下列之第一原理計算軟體（可多選）

VASP CASTEP WIEN2K SIESTA 其他

（若你所屬的研究室已有 VASP，進階課程的實習課可直接使用自己的電腦叢集練習）

目前是否正在從事第一原理相關課題之研究：是；否

若上題之答案為是，請簡要說明你的研究內容：

若上題之答案為否，學生請附上指導教授之推薦函，博士後研究員則需附上計劃主持人之推薦函。

初階課程作業之計算結果（所有申請進階課程之學員皆要繳交）

（請參考初階課程之例題盡量完成下面的題目，需附上各計算之 POSCAR 的資料，若你使用 VASP 以外之軟體計算則請附上其原子結構之輸入資料）：

1. 請計算鎢 W 和鎳 Ni 的晶格常數 (lattice constant)，態密度 (density of states) 和能帶結構 (band structures)，並檢查 K 點數目 (the number of K-points)，截止能量 (energy cutoff) 和晶格常數與費米能量 (Fermi energy) 間的關係。
2. 鎢 W(100)及鎳 Ni(100)表面之鬆弛程度、表面能及功函數為何？請分別列出 1、3、5 層之厚層計算所得之結果。【表面鬆弛 = $100\% \times (d_1 - d_0)/d_0$ 】
3. 氧 O₂ 分子之鍵長及鍵能為何？請分別列出 5、10、15Å 之晶胞大小計算結果。

※ PS：請依照作業範本的格式列印您的作業。