

2014第一原理材料計算初階課程

第一梯次：April 26-27, 2014

第二梯次：May 17-18, 2014

成功大學國家理論科學研究中心及計算機中心

2014 第一原理材料計算初階課程

第一梯次行前通知(2014/04/26-04/27)

您好，

歡迎參加「第一原理材料計算初階課程」第一梯次，此次活動於台南市國立成功大學(國家理論科學研究中心 2F/R203 及資訊大樓計算機與網路中心電腦教室 2F/R201)舉辦，課程開始時間為 103 年 4 月 26 日上午 09:00AM，並於 103 年 4 月 27 日下午 17:00 PM 結束。請於 4 月 26 日(六)上午 08:40-09:00AM 間，自行前往理論中心 2F 報到。

課程地點：國家理論科學研究中心 203 室(成功校區)、計中 201 教室(課程期間，請坐同一位置)。

上課時間：4 月 26 日 09:00-12:00、4 月 27 日 09:00-12:00。

上機操作：4 月 26 日 13:00-17:00、4 月 27 日 13:00-17:00。

我們將安排外地學員住宿於成功大學迎賓苑招待所及光華飯店(住宿規定：Check-in: 14:00PM~22:00PM 自行前往迎賓苑或光華飯店櫃檯，Check-out: 10:00AM 前將鑰匙歸還放於櫃檯即可)，並提供兩天午餐便當，及一份書面講義(課程相關資料請先上網下載預習！錄取通知(4/8 寄出)及 vi 編輯器練習的說明，請見附件一、二)。

參與此活動所繳交之保證金，將於活動結束後退還給全程參與課程者，並補助全額住宿費用；未全程參與課程者需自行負擔住宿及餐費等。住宿資訊 <http://www.ncts.ncku.edu.tw/phys/cmr/140426/acc.php>

課程期間請同學注意自身的安全，並請同學們記得攜帶水杯、學員證、身分證、學生證、健保卡、雨具、薄外套...等，以備不時之需，切記...勿攜帶貴重物品。

國家理論科學研究中心位置圖：<http://www.ncts.ncku.edu.tw/phys/ch/map.php>

祝 愉快 ~

- PS：
1. 請於每日上午及下午簽到點名，未全程參與課程者：不退回保證金，且需自付住宿餐費等。
 2. 若有任何問題，請洽 傅小姐 06-2757575#65081
 3. 請同學們記得自行攜帶水杯，響應環保！
 4. 禁止攜帶任何食物飲料進入電腦室。



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，錄取梯次為**第一梯次(2014/04/26-04/27)**。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 xcrysden、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 2014 年 4 月 8 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

vi 編輯器的練習的說明

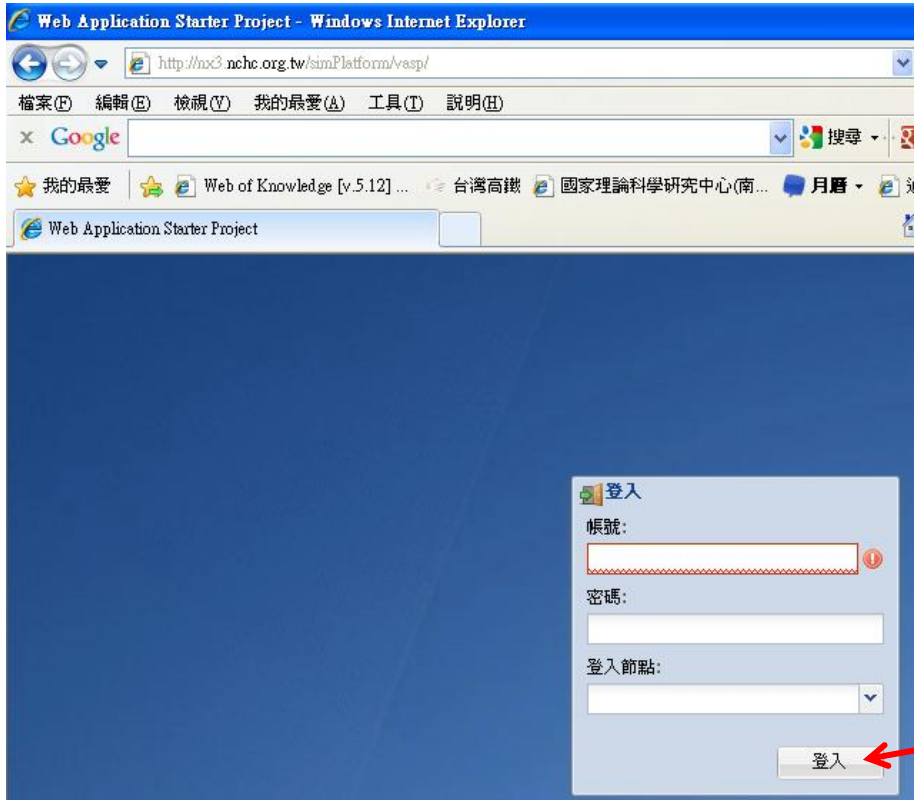
因為本課程的實習課是Unix 的工作環境。過去的經驗告訴我，如果你完全未用過Unix 的指令及其 vi 編輯器，你將很難跟上進度，希望學員一定要預先作練習。我們提供了Unix 指令的簡介，以及 vi 編輯器的介紹（請參閱網站中的13&14-unix.pdf 為其講義；13-unix.exe、14-fortran.exe則為其課程錄影）歡迎學員下載收看，並作適度之練習。今年國高建立了一個平台，讓學員可以在個人電腦 Window 環境下，藉由 IE 到國高體驗 Unix 的指令及其vi編輯器的練習。

由於這個帳號為共同測試帳號，故請不要更改密碼，此外，你可能發現別人已在此帳號下建立了INCAR, KPOINTS, POSCAR等三個檔案，沒有關係，你可以自己再做一次，此練習的目的祇是讓你熟習如何用vi建立檔案，不要到真正上課時才練習vi，結果一直出錯，花了半的小時才打完一個INCAR。所以沒有用過vi 的學員，一定要事先練習。

注意:請學員不要用此帳號從事個人的研究工作，謝謝！

請以 IE 或 Google Chrome 連接到以下的網址
(國家高速網路與計算中心 高速電腦 - ALPS)

<http://nx3.nchc.org.tw/simPlatform/vasp/>



登入

帳號:
t00che80

密碼:
.....

登入節點:
ALPS

登入

t00che80

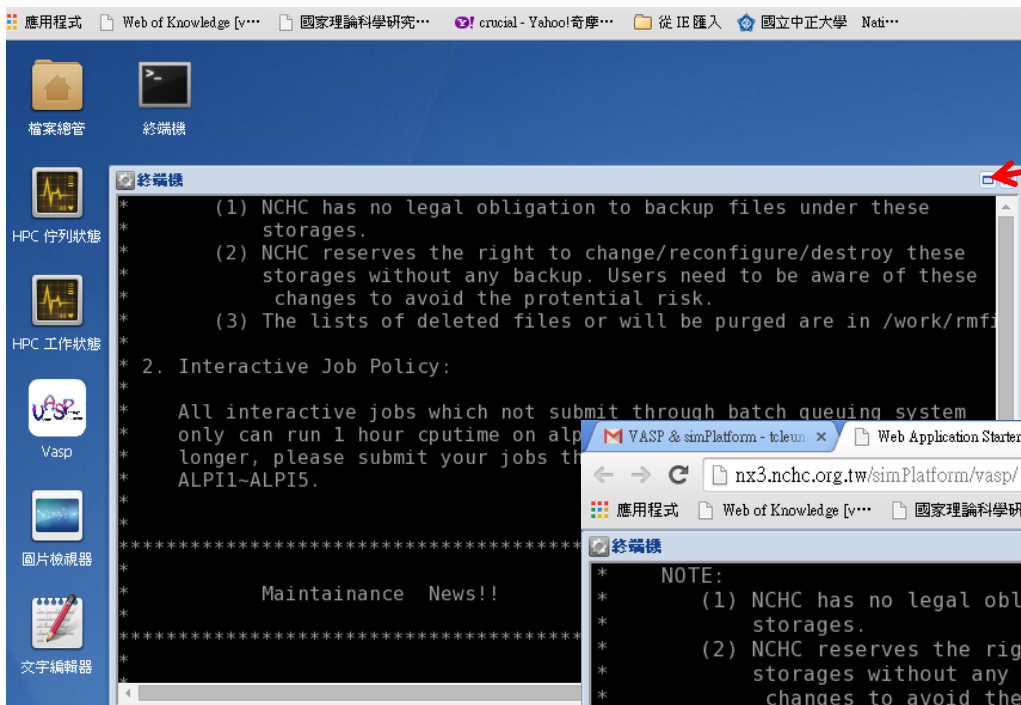
lps042680

選擇 ALPS



進入 APLS 後再點選終端機





點選，變成全螢幕，
如下圖。




```
System = bcc W(100)-5 layers
ISMEAR = 1
SIGMA = 0.2
RWIGS = 1.455
ISIF = 2
NSW = 50
IBRION = 2
```

請學員在參加課程前完成以下三個檔案之建立，熟習以vi建立檔案，並練習 Unix 環境下的一些指令。

System = bcc W(100)-5 layers
ISMEAR = 1
SIGMA = 0.2
RWIGS = 1.455
ISIF = 2
NSW = 50
IBRION = 2

10x10x10
0
Monkhorst
10 10 10
0 0 0

POSCAR

BCC Fe Bulk

2.8370000000000000

-0.4840460445312441	0.4840460445312441	0.4840460445312441
0.4840460445312441	-0.4840460445312441	0.4840460445312441
0.4840460445312441	0.4840460445312441	-0.4840460445312441

1

Direct

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

Unix 環境下的指令 與 vi 編輯器的簡介

進入Unix 世界

Login:guest ←account name

Password:***** (abcdef) ←password

由於這個帳號為共同測試帳號，
故請不要更改密碼。

更改密碼 % passwd

一些常用之指令

% pwd (顯示現在所在之目錄)

/user/leung/lapw/cu

% cd ../Fe (改變目錄)

% ls *.f (列出所有 *.f 之 files)

% ls -l (long list)

% ls -l

```
-rwxrwxrwx  1 users  user 4564 Jun11 20:45 love
dr--r----- 2 users  user  547 Jun11 22:50 sub/
-rw-rw-r--  1 users  user 4135 Jun21 11:20 t1
```

↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑
 u g o owner group 大小 時間 名稱

% chmod u+x filename

% chmod 741 filename

% ls-a (將隱藏檔案列出, eg .csrch .login)

% ls-F (將可執行之檔後加*,目錄加/)

love ppd* t1* sub/ test/

0	000	---
1	001	--X
2	010	-W-
3	011	-WX
4	100	r--
5	101	r-X
6	110	rw-
7	111	rwx

% mkdir dname

% rmdir dname

% rm filename (刪除filename)

% mv filename1 filename2 (改名)

% cp [-i p r] filename target (複製)

i:要確認

p:保留原時間

r:複製子目錄

% cat filename (>test)

列出filename之內容並將之放入test之中

% move filename

列出filename之內容,每一螢幕停一下

% head -n filename

將filename之前 n 行列出

% tail -n filename (>>test)

將filename之最後 n 行列出 (並附在 test 後)

% grep -i string filename

從filename找出含string之行, 不計大小寫

% grep 'total energy' filename

% find -name filename -print

尋找filename之所在,並列出其路徑

?,*,[],{ }

```
ls hw?      →hw2,hw3,hw4
ls hw??     →hw11,hw12
ls hw*      →hw2,hw3,hw4,hw11,hw12
ls hw[2-11] →hw2,hw3,hw4,hw11
ls hw{2,12} →hw2,hw12
ls test[a-c] →testa,testb,testc
```

alias

```
alias la ls-a ;
alias ch1 'cd /usr/john ; ls-l'
alias rm 'rm -i';
alias hm 'history | more '
```

unalias

```
Unalias ch1
```

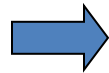
欲看目前已有之別名定義,可鍵入alias

編輯器vi

% vi filename

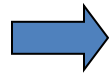
There are 2 modes in vi editor : (1) insert mode, (2) command mode

i,a,o,I,A,O



insert mode (鍵入字元(內容))

ESC



command mode (執行命令)

在 command mode 下，可執行之指令：

h(←), j(↓), k(↑), l(→)

nG

到第n行

G

到最後一行

^g

顯示游標所在之行數

^f

視窗下移一螢幕

^b

視窗上移一螢幕

x	刪除游標所在之字元
dd	刪除一行
ndd	刪除n行
u	undo 上一命令
p,P	貼回
/string	找字串
:q!	quit
:zz	存檔(原名)
:w! filename	存檔為filename
:set ic	忽略大小寫
:set nu	列出行數
:1,\$ s/string1/string2/g	更改字串
:n1,n2 w! filename	將n1到n2行寫入
:r filename	讀入filename