

# 2014 Summer School on First-principles Computational Materials Research -Advance Level

2014第一原理材料計算進階課程

August 11-15, 2014

成功大學國家理論科學研究中心及計算機中心

報名截止：2014 年 7 月 4 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，請勿字體潦草)

## 住宿安排 Room Reservation : (提供 8/11 ~ 8/14 夜共 4 夜為主，住成大學生宿舍、招待所、南寶飯店等。)

Type：☐ 住宿日期從 8 月\_\_\_\_\_日至\_\_\_\_\_日，共\_\_\_\_\_夜。(前一夜 8/10 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 ☐ 南寶飯店 ☐ 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南寶飯店為主，並依報名繳款順序來預留房間)

餐點 Meal：☐8/11 素午餐；☐8/12 素午餐；☐8/13 素午餐；☐8/14 素午餐；☐8/15 素午餐；

☐8/11 葷午餐；☐8/12 葷午餐；☐8/13 葷午餐；☐8/14 葷午餐；☐8/15 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](mailto: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/140811>

接下頁

# 2014 Summer School on First-principles Computational Materials Research -Advance Level

2014第一原理材料計算進階課程

August 11-15, 2014

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。）

☐已 email 繳交 ☐未繳交，請於報名時一併繳交。

（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 O<sub>2</sub> 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。