

课程大纲

COURSE SYLLABUS

1.	课程代码/名称 Course Code/Title	Computational Materials Science/计算材料学 MSE5021
2.	课程性质 Compulsory/Elective	专业选修课 (Specialty Elective Course)
3.	课程学分/学时 Course Credit/Hours	3 学分/48 学时
4.	授课语言 Teaching Language	English
5.	授课教师 Instructor(s)	罗光富
6.	是否面向本科生开放 Open to undergraduates or not	是
7.	先修要求 Pre-requisites	本科生：以下课程修过其中一门：MSE203 晶体学、MSE310 半导体材料与器件、EE203 固态电子学、PHY321-15 固体物理、PHY326-15 半导体物理与器件 研究生：无
8.	教学目标 Course Objectives	<p>(1) 学习计算材料学的基础理论：掌握密度泛函理论、分子动力学方法及多体量子力学方法的基本知识；</p> <p>(2) 能够利用主流的科学软件获得可靠的计算结果；</p> <p>(3) 能够通过计算方法解决几个具体领域中的关键问题；</p> <p>(4) 通过英语教学，增强专业英语能力，能够阅读英语专业文献</p>
9.	教学方法 Teaching Methods	课堂讲授、上机实习
10.	教学内容 Course Contents	<p>Section 1</p> <p>第一章：计算材料科学概述</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 理解计算材料学在当今材料科学研究中的重要作用 2. 熟悉目前的主流方法、主要数据库资源 <p>Section 2</p> <p>第二章：密度泛函基础</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 理解密度泛函方法的基础理论：Hohenberg-Kohn 定理 2. 熟悉密度泛函方法所采用的 Kohn-Sham 方程 3. 熟悉常用的交换关联函数以及局限性。 4. 了解晶体和分子计算时的重要参数 <p>Section 3</p> <p>第三章：密度泛函方法上机实习</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 熟悉 VASP 程序的主要输入、输出文件，主要参数 2. 掌握利用 VASP 程序完成能量和力常数计算、结构优化、收敛测试 3. 掌握态密度、磁矩、杨氏模量、介电常数、势垒、光学性质、能带的计算

Section 4	<p>第四章：分子动力学基础</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 理解波恩-奥本海默近似是分子动力学的基本近似 2. 理解分子动力学的主要优点是能包含有限温度下的复杂相互作用，局限在于模拟的时空尺度有限 3. 掌握 NVT, NPT, NVE 模拟的区别 4. 了解分子动力学模拟所能获取的性质
Section 5	<p>第五章：分子动力学方法上机实习</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 掌握使用 VASP 软件完成第一性原理的分子动力学模拟材料的振动性质 2. 掌握使用 Lammmps 软件完成经典分子动力学模拟表面反应、扩散过程
Section 6	<p>第六章：多体量子力学方法简介</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 熟悉 GW 方法计算能带的流程 2. 熟悉 BSE 方法计算吸收光谱的流程
Section 7	<p>第七章：多体量子力学方法上机实习</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 使用 VASP 程序准确计算晶体材料的能带，并与密度泛函方法以及实验结果做比较 2. 使用 VASP 程序准确计算晶体材料、分子的吸收光谱，并与密度泛函方法以及实验结果做比较
11. 课程考核 Course Assessment	
<ol style="list-style-type: none"> 1. 出勤 15 分（前 3 次缺课不扣分，超过 3 次后，每缺一次扣一分，直至扣完） 2. 平时作业 55 分 3. 期末考试 30 分 	
12. 教材及其它参考资料 Textbook and Supplementary Readings	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Introduction to Solid State Physics, Charles Kittel 2. Density Functional Theory: A Practical Introduction, Sholl & Steckel 3. Materials Modelling using Density Functional Theory: Properties and Prediction, Feliciano Giustino 	