

研究生课程教学大纲 (Syllabus)

课程代码 Course Code	PHY8305	*学时 Teaching Hours	32	*学分 Credits	2
*课程名称 Course Name	计算材料物理 Computational Material Physics				
*授课语言 Instruction Language	中文 (Chinese)				
*开课院系 School	物理与天文学院 (School of Physics and Astronomy)				
先修课程 Prerequisite	四大力学、固体物理。				
授课教师 Instructors	姓名 Name	职称 Title	单位 Department	联系方式 E-mail	
	孙弘	教授	物理与天文学院	hsun@sjtu.edu.cn	
*课程简介 (中文) Course Description	通过本课程的学习, 学生将理解密度泛函第一性原理计算的理论基础, 掌握赝势、交换相关能等基本物理概念, 以及了解各类第一性原理计算软件中常用的计算处理方法, 如赝势的构造方法、布利渊区波矢样点的取法、和电子态的自洽循环计算方法。最后通过上机实践, 使学生掌握对一些简单晶体材料晶格常数、电子能带的第一性原理计算, 加深对材料电子能带图的理解, 为深入学习其它课程打下基础。				
*课程简介 (English) Course Description	This course is designed to give an introduction to the theoretical basis of density functional first-principles calculations, so that the students comprehend the basic physical concepts such as pseudopotentials and exchange-correlation energies, and understand the calculation methods commonly used in various first-principles calculation software, such as the construction method of pseudopotential, the sampling method of Brillouin zone wave vector, and the calculation method of self-consistent cycle of electronic state. Finally, through computer practice, students can master the first-principles calculation of lattice constants and electronic energy bands of some simple crystal materials, deepen their understanding of electronic energy band diagrams of materials, and lay a foundation for further study of other courses.				
*教学安排 Schedules	周次 Week	教学内容 Content	授课学时 Hours	教学方式 Format	授课教师 Instructor
	1	第一章 密度泛函理论 1.1 密度泛函理论 1.2 Thomas-Fermi 方程	2	lecture	孙弘
	2	1.3 Kohn-Sham 方程 1.4 泛函的变分和导数	2	lecture	孙弘
	3	第二章 赝势 2.1 赝势的导出 2.2 第一性原理的赝势	2	lecture	孙弘
	4	2.3 赝势的 Kleinman-Bylander 表示形式 2.4 其它赝势 2.4 赝势的数值计算	2	lecture	孙弘
	5	第三章 交换相关能 (LDA 和 GGA) 3.1 交换相关能得一般表达式 3.2 局域密度近似 (LDA)	2	lecture	孙弘

	6	3.3 广义梯度近似 (GGA) 3.4 其它形式的交换相关能近似	2	lecture	孙弘
	7	第四章 总能量及作用力 4.1 晶体结构的总能量 4.2 总能量求和发散的处理方法	2	lecture	孙弘
	8	4.3 动量空间的 K-S 本征值方程 4.4 原子的作用力	2	lecture	孙弘
	9	第五章 布里渊区波矢的样点 5.1 星函数 5.2 Chadi-Cohen 样点方法	2	lecture	孙弘
	10	5.3 Monkhorst-Pack 样点方法 5.4 金属材料中布里渊区求和	2	lecture	孙弘
	11	第六章 自洽循环方法 6.1 线性组合方法 6.2 Broyden 方法	2	lecture	孙弘
	12	第七章 上机实验程序介绍 7.1 赝势生成程序运行步骤介绍 7.2 第一性原理计算程序介绍	2	lecture	孙弘
	13	指导上机实验	2	experiment	孙弘
	14	指导上机实验	2	experiment	孙弘
	15	指导上机实验	2	experiment	孙弘
	16	指导上机实验	2	experiment	孙弘
*考核方式 Grading Policy	<p>第 17-18 周根据上机实验的数据, 完成上机报告。</p> <p>上机实验和上机报告要求:</p> <p>(1) 自选一种 (简单) 晶体材料, 给出该晶体的原胞基矢和倒格子基矢 (直角坐标系)、原胞内各原子的位置 (以基矢为单位)、和布里渊区高对称点的位置 (以倒格子基矢为单位)。</p> <p>(2) 画出晶体原胞和对应布里渊区图形, 并标出原子位置和布里渊区高对称点位置。</p> <p>(3) 给出产生赝势所用的 Atom.ini 文件。</p> <p>(4) 给出确定原胞结构的 input 文件和电子能带计算的 input 文件。</p> <p>(5) 给出 r_c 的收敛测试结果 (总能量和晶格常数随 r_c 的变化表格)。</p> <p>(6) 给出 k 点的取法, 以及收敛测试结果 (总能量和晶格常数随 k 点的变化表格)。</p> <p>(7) 给出 E_{cut} 的数值, 以及收敛测试结果 (总能量和晶格常数随 E_{cut} 的变化表格)。</p> <p>(8) 给出计算所得的晶格常数, 并与实验和/或前人结果 (网上搜索) 比较。</p> <p>(9) 画出计算所得的电子能带图, 并与前人结果 (网上搜索) 比较。</p>				
*教材或参考资料 Textbooks & References	<p>参考书:</p> <p>R. M. Martin Electronic Structure - Basic Theory and Practical Methods</p>				
备注 Notes					

备注说明：

1. 带*内容为必填项；
2. 课程简介字数为 300-500 字；教学内容、进度安排等以表述清楚教学安排为宜，字数不限。