



材料计算与模拟

2014 春季学期

任课教师：陶国华

网页 <http://web.pkusz.edu.cn/taoguohua>

材料专业选课 32 学时 2 学分

教材：R. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press (2008).

参考书：C.Trindle and D. Shillady, *Electronic Structure Modeling*, CRC Press (2008).

评分标准：课堂报告 20%+调研报告 20%+课程论文 60%。

课堂讨论形式：每人 45 分钟（报告 35-40 分钟+讨论 5-10 分钟），每次课 2 人。报告以每次课程内容为基础，重点在理解、体会、应用以及疑难等，文本提前一天提交。

课程安排

第一周：(3 学时)

1. 绪论：量子理论与电子结构基础（第 1、2 章）

第二周：(3 学时)

2. 电子结构基础、Hartree-Fock 近似与交换相关能（第 3 章）

第三周：(3 学时)

3. 晶体结构和能带、布里渊区、四面体布点方法（第 4 章）；均匀电子气（第 5 章）

第四周：(3 学时)

4. 密度泛函理论基础、交换相关泛函（第 6、7、8 章）

第五周：(3 学时)

5. 求解 Kohn-Sham 方程（第 9、10 章）

第六周：(3 学时)

6. 赝势理论（第 11 章）

第七周：(3 学时)

7. 平面波格点方法（第 12、13 章）

第八周：(3 学时)

8. 局域轨道方法：紧束缚近似（第 14、15 章）

第九周：(3 学时)

9. 缀加平面波方法（第 16、17 章）

第十周：(3 学时)

10. 第一性原理分子动力学（第 18 章）

提交课程论文