



## 材料计算与模拟

2016 春季学期

任课教师：陶国华

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

材料专业选课 32 学时 2 学分

参考书：

1. R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press (2008).
2. C.Trindle and D. Shillady, Electronic Structure Modeling, CRC Press (2008).
3. Frenkel and Smit, Understanding Molecular Simulation, Academic Press (2008).

评分标准：课堂调研报告 40%+课程论文 60%。

### 课程安排

第一周：(2 学时)

1. 绪论：物质微观理论与模拟方法（第 1、2 章）

第二周：(2 学时)

2. 电子结构基础（第 3 章）

第三周：(2 学时)

3. 晶体结构和能带（第 4、5 章） 课堂调研

第四周：(2 学时)

4. 密度泛函理论基础（第 6、7、8 章）

第五周：(2 学时)

5. 求解 Kohn-Sham 方程（第 9、10 章）

第六周：(2 学时)

6. 赝势理论（第 11 章） 课堂调研

第七周：(2 学时)

7. 平面波方法（第 12、13、16、17 章）

第八周：(2 学时)

8. 局域轨道方法：紧束缚近似（第 14、15 章）

第九周：(2 学时)

9. 分子动力学模拟原理及应用 课堂调研

第十周：(2 学时)

10. 分子动力学模拟原理及应用

第十一周：(2 学时)

11. 量子动力学基本方法 课堂调研

第十二周：(2 学时)

12. 半经典分子动力学方法及应用

第十三周：(2 学时)

13. 半经典分子动力学方法及应用

第十四周：(2 学时)

14. 非绝热分子动力学方法及应用  
第十五周：(2 学时)
15. 非绝热分子动力学方法及应用  
第十六周：(2 学时)
16. 第一性原理分子动力学（第 18 章）

**提交课程论文**