

اداره آموزش عالی آزاد

دانشگاه صنعتی خواجه
نصیرالدین طوسی



دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

در دانشکده فیزیک برگزار می کنند

کارگاه مقدماتی کد محاسباتی Siesta

رقیب اصلی نرم افزار گرانقیمت ATK



در حل مسائل تراپردی
ToolKit

سایت ثبتنام: www.NRTC.IR



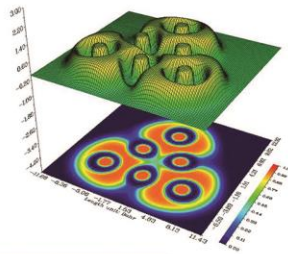
شماره تماس: ۰۹۰۵۹۹۴۰۳۳۰

تاریخ برگزاری ۲ و ۳ آذرماه ۱۳۹۶

SOFTWARE:

موضوعات:

siesta



- اهمیت و جایگاه فیزیک/شیمی محاسباتی
- نصب بسته محاسباتی Siesta
- نحوه ورودی نویسی و معرفی سافتوار مورد نظر و انجام تنظیمات اولیه
- بهینه سازی سافتوار مورد مطالعه و محاسبه طول و زوایای پیوندی و شکل کلی سافتوار با استفاده از تقریب های GGA, LDA
- آموزش محاسبه سافتوار نواری و چگالی حالت کلی و چگالی حالت جزئی و تحلیل نمودارها
- آموزش نحوه محاسبه و رسم نمودار منحنی جریان-ولتاژ و ضرایب عبور تراپردی
- آشنایی با نرم افزار کمکی Xcrysden جهت بررسی شماتیک جزئیات سافتوار مورد مطالعه

ظرفیت محدود می باشد

مکان برگزاری تهران - دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی



کانال تلگرام

