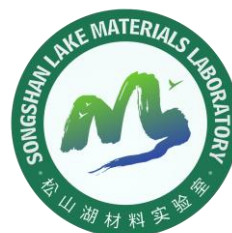


# 松山湖材料实验室 材料计算与数据库平台 第一届 超算应用与材料计算培训班



着眼于建设世界一流的材料科学研究基地，松山湖材料实验室将本着合作、共享和开放的精神，重点建设中子科学、材料制备与表征、微加工与器件、材料计算与数据库等平台，为松山湖材料实验室和国家材料科学重大领域的研究和关键技术的创新突破提供稳定、先进的科学技术支撑。

第一届《超算应用与材料计算培训班》的目的是为了让平台未来用户更好的了解和使用平台资源。通过短期的培训，让学员迅速掌握基于量子力学的材料模拟方法，学会目前最流行的材料计算软件和方法，并可以使用松山湖材料实验室材料计算与数据库平台的“天工”超算集群更好的开展材料计算。

主题：超算应用与材料计算培训班

时间：2019年7月23日-7月24日

报名时间：2019年7月10日之间

地点：松山湖材料实验室 东莞市松山湖大学创新城A1栋 202会议室

费用：1000元/人（参加人可获赠2000核小时超算机时）

住宿：由会议主办方统一预定，费用由参加人承担。

学员总数：50人（之后的注册用户有可能无法获得参会机会）

## 培训日程（拟）

7月23日上午		
08:30-08:45	松山湖材料实验室领导讲话	
08:45-09:00	孟胜	开幕式讲话
09:00-09:30	梁英宗	1. 高性能计算系统介绍 HPC101
09:30-10:00	梁英宗/贾华显	2. 松山湖材料实验室时HPC系统 学员账户注册
10:00-10:30	照相、茶歇	
10:30-11:30	梁英宗	3. Linux 基础使用方法 Linux101
11:30-12:00	梁英宗	松山湖材料实验室时HPC系统 硬件部分简介、参观

7月23日下午		
14:00-14:45	张萃	4. 固体物理与密度泛函理论基础（一） 晶体学基础知识 密度泛函理论基础
14:45-15:30	贾华显	5. 松山湖材料实验室时HPC系统 基础使用方法和上机实习（一）
15:30-16:00	茶歇、交流、讨论	
16:00-16:45	王恩	6. 密度泛函理论程序包VASP基础使用及 上机实践（一）
16:45-17:30	王恩	7. 密度泛函理论程序包VASP基础使用及 上机实践（二）

7月24日上午		
08:30-09:15	孟胜	8. 固体物理与密度泛函理论基础（二） 密度泛函物理进阶
09:15-10:00	孟胜	9. 固体物理与密度泛函理论基础（三） 含时密度泛函理论简介
10:00-10:30	茶歇、交流、讨论	
10:30-11:30	游佩桅	10. 密度泛函理论程序包SIESTA基础使 用及 上机实践
11:30-12:00	游佩桅	11. 含时密度泛函理论程序包TDAP基础使 用 及上机实践

7月24日下午		
14:00-14:45	张文星	12. 热电输运计算方法
14:45-15:30	张文星	13. 热电输运计算方法
15:30-16:00	茶歇、交流、讨论	
16:00-16:45	王恩	14. 实用工具包pymatgen的基础使用方法 生成计算输入文件 处理晶体结构
16:45-17:30	贾华显	15. 实用工具包pymatgen的基础使用方法 查看计算结果 调用数据库内容并查询