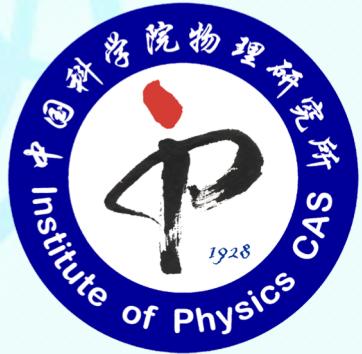


Last login: Sun Oct 6 10:01:12 2013 from 10.10.10.251

2.255
link>
tion in ifconfig(8).
00:00:00:00 txqueuelen 256 (InfiniBand)

2020-02-01

2



材料数据库使用方法

刘淼

Wednesday, February 26, 2020 — 松山湖 广东

Outline

- 简介
- Materials Project 使用
- Pymatgen 软件包的基本功能介绍
- Materials Project API 使用
- Atomly 材料数据库预览

Databases



<https://icsd.fiz-karlsruhe.de/> 晶体结构实验数据 收费

FIZ Karlsruhe – Leibniz Institute for Information Infrastructure



<http://www.crystallography.net/cod/> 晶体结构数据 开源



<http://paulingfile.com> 晶体结构数据 收费

Databases



The Materials Project
www.materialsproject.org

DFT数据/程序包 免费浏览



<http://oqmd.org>

DFT数据

免费浏览



<http://aflowlib.org>

DFT数据

免费浏览



<https://www.nomad-coe.eu>

DFT数据共享

免费浏览



<https://www.materialscloud.org>
<http://www.aiida.net>

高通量计算框架

开源

Databases



<https://materialsdata.nist.gov>

DFT数据

免费浏览

<https://jarvis.nist.gov>



<http://matcloud.cnic.cn>

DFT计算平台

数据开源
计算资源收费

北大新材料

<http://www.pkusam.com>

HSE能带

免费浏览



<http://materiae.iphy.ac.cn/>

拓扑

免费浏览



<https://www.topologicalquantumchemistry.org>

拓扑

免费浏览

材料发现的第四范式

Traditional approach

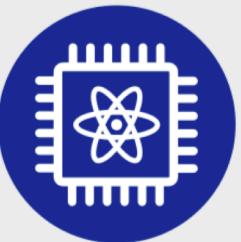
(1st, 2nd, 3rd paradigms)



实验



理论



计算



new materials
基于试错

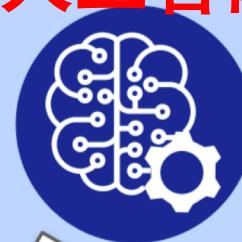
Database driven approach

(4th paradigm)

数据库



人工智能



collect and share

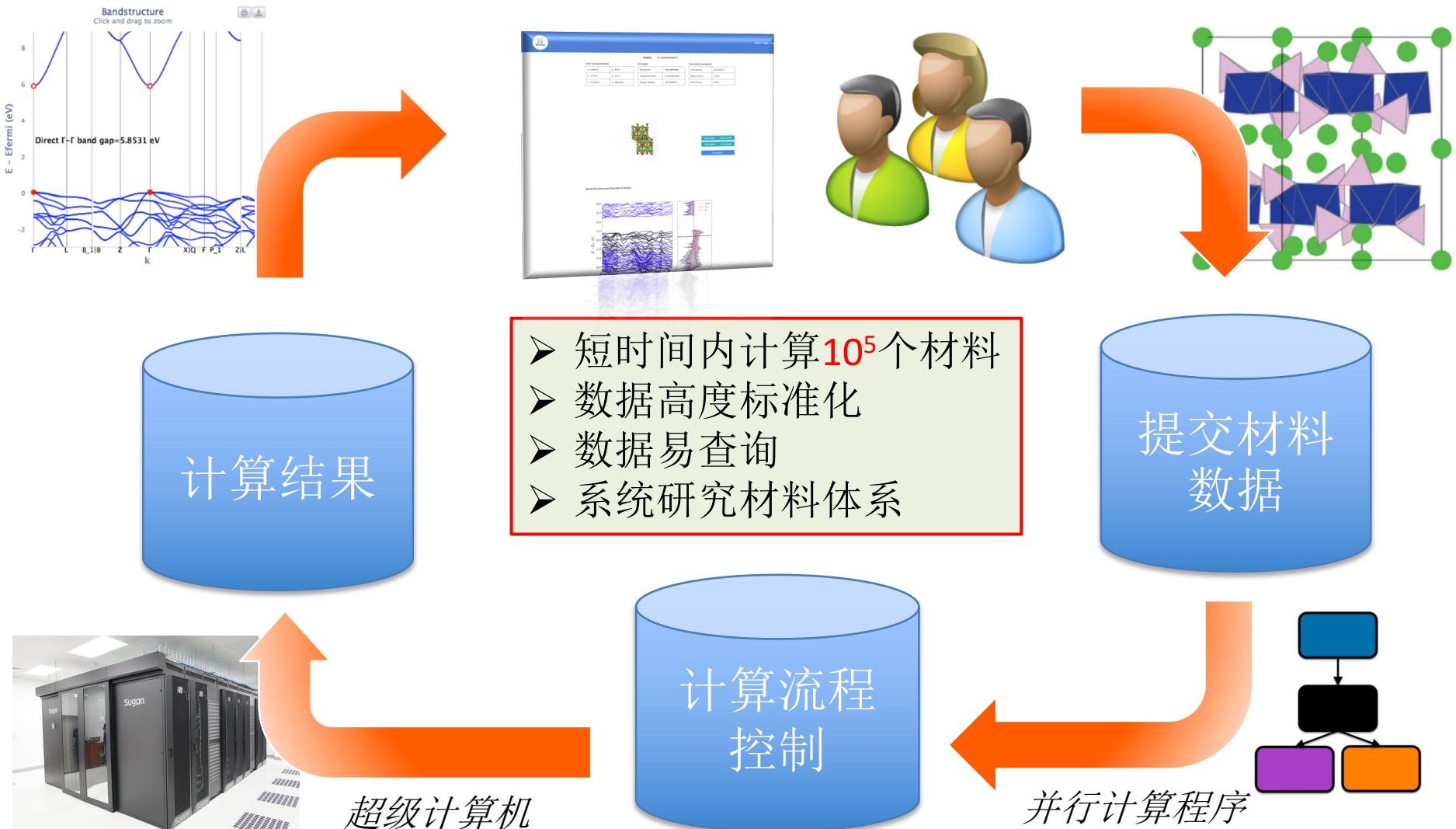


new materials
基于理论预测

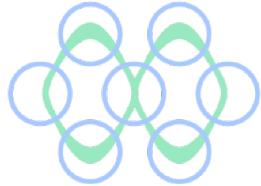
➤ 材料数据是核心

➤ 数据库是重要载体

高通量材料计算流程

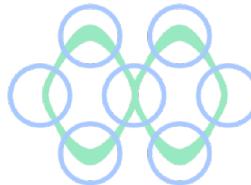


MP demo



The Materials Project
www.materialsproject.org

Pymatgen demo



The Materials Project
www.materialsproject.org

pymatgen

<https://pymatgen.org>

Databases



开发中

