

2010 年中国科学院超级计算中心计算化学软件

NWChem 讲习班通知

为普及和推广高性能计算化学软件使用、培养高性能计算化学专业人才，中科院计算机网络信息中心、美国能源部西北太平洋国家实验室（PNNL）下属环境分子科学实验室（EMSL，Environmental Molecular Sciences Laboratory）和清华大学将于 2010 年 12 月 11~13 日在北京联合举办 2010 年中国科学院超级计算中心计算化学软件 NWChem 讲习班。

NWChem 是运行在高性能并行超级计算机和 workstation 集群上的开源大规模并行计算化学软件。该软件使用标准量子力学方法描述电子波函数或密度，计算分子和周期性系统的特性，还可进行经典分子动力学和自由能模拟，当前版本为 6.0。本次培训将面向 NWChem 软件使用、本着“理论指导实践、学以致用、加强交流”目的，利用中科院超算中心高性能计算机系统“深腾 7000”所提供的一流高性能计算机软硬件环境，为广大学员带来高性能计算化学的深度体验。我们特邀 NWChem 开发团队的多位专家——来自美国能源部西北太平洋国家实验室（PNNL）下属环境分子科学实验室（EMSL）的 William A. Shelton 博士、Wibe Albert de Jong 博士、Niranjan Govind 博士、Ping Yang 博士担任主讲教师，同时兼顾计算化学前沿研究的热点科学问题。在培训期间，我们将为广大学员提供上机实践的机会。

- **培训对象：**

深腾 7000 用户、从事计算化学、计算材料研究的科研院所和高校教师、研究生、科研工作人员及相关企业工程师。

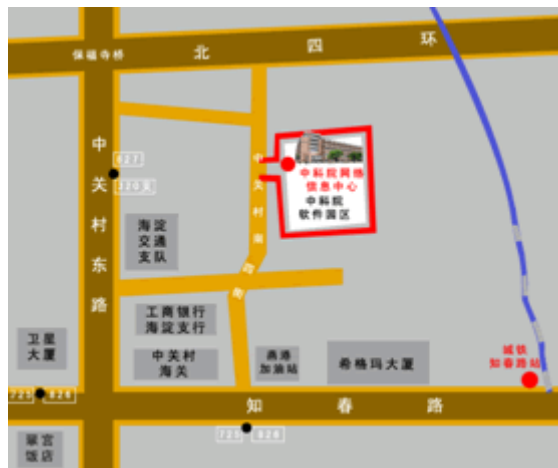
- **培训时间：**

2010 年 12 月 11 日~13 日，报名截止时间：2010 年 12 月 9 日，名额有限，报名从速。

- **培训地点：**

中科院计算机网络信息中心 5 层 514 会议室

详细地址：北京市海淀区中关村南四街四号中科院软件园区 2 号楼



- **培训费用：**包括教材费、培训费、上机费、午餐费

科学院院内：¥500 元/人；

院外教育科研：¥600 元/人；

企业：¥1000 元/人。

- **报名方式：**

按照报名回执表的要求填写各项内容，然后发邮件到liuqian@sccas.cn，我们将在一个工作日之内给予回复。联系人：刘倩博士，联系电话：010-58812143。

- **付款信息：**

电汇（推荐）：截止日期 2010 年 12 月 7 日（含）。凭汇款单在签到时领取发票，请在汇款备注留言中填写正确的发票单位名称及超算计算化学培训。

收款单位全称：中国科学院计算机网络信息中心

开户行名称：中国工商银行海淀支行营业部

账号：0200049609200016431

现场付款：签到当天可以直接用现金或支票付款，并开具发票

● **拟定培训内容（详见课程安排，如有变更，请以实际培训为准）：**

Nwchem 介绍及 Nwchem6 新功能介绍

Nwchem 使用和上机

Ground and Excited States with DFT and TDDFT

Correlated Methods for Ground and Excited states

Relativity, Spectroscopy and the EMSL Basis Set Library

Classical Molecular Dynamics and QM/MM

Ab Initio Molecular Dynamics

中国科学院超级计算环境使用

● **市内乘车路线：**

1、机场乘车线路：乘坐民航班车（首都机场—中关村）终点（即四环保福寺桥）下车，换乘 641 或 619 到海淀交通支队站下车；

2、北京西客站乘车线路：乘坐 319 到海淀交通支队站下车；

3、北京站乘车线路：乘坐地铁 2 号线到西直门站，换乘城铁 13 号线到知春路站下车。

附近公交站：海淀交通支队、知春里东站，具体公交线路请查询：

<http://www.bjbus.com/index.htm>

● **住宿推荐:**

旅馆名称	联系电话	参考价格*	位置说明	备注
物科宾馆	010-82649482	高档间: 300元/夜 标准间: 162元/夜 三人间: 243元/夜 四人间: 304元/夜	中关村南三街8号 (中科院物理所 园区内)	需提前预订; 步行时 间15分钟。
天创宾馆	010-51192000	单人间: 150元/夜 双人间: 240元/夜 双人间: 280元/夜(大)	中关村南一条甲1 号	需提前预订; 中关村 教学大楼南对面, 步 行时间10分钟。
康拓宾馆	010-68378288 010-62634975	单人间: 130元/间/夜 双人间: 80元/床/夜 三人间: 60元/床/夜	中关村南一条甲4 号	需提前预订; 中关村 教学大楼南对面, 步 行时间10分钟。
中科院空间 会议中心	010-62582916	双人间: 162元/间/夜 三人间: 183元/间/夜	中关村南二条甲1 号(青年公寓南)	需提前预订; 步行时 间8分钟。
青年公寓2号 楼招待所	010-82680799	单人间: 60元/间/夜 双人间: 85元/间/夜 三人间: 38元/床/夜 四人间: 38元/床/夜	中关村东路80号 (中科院研究生 院青年公寓)	需提前预订, 步行时 间12分钟。

*以实际报价为准