

# 2014 年 VASP (MedeA) 软件讲习班

## 通知(第二轮)

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，中国科学院超级计算中心、中国科学技术大学与源资信息科技（上海）有限公司将于2014年7月22~24日在北京联合举办2014年VASP (MedeA) 软件讲习班。

本次培训将面向 VASP 广大用户，本着“理论指导实践、学以致用、加强交流”的原则，利用中国科学院超级计算中心高性能计算机系统所提供的一流软硬件环境，为广大学员提供高性能计算化学的深度体验。同时，我们还将为广大学员提供与专家面对面交流的机会，丰富学员的理论与实践经验。

VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) 软件是维也纳大学 Hafner 小组开发的进行电子结构计算和量子力学-分子动力学模拟软件包。它是目前材料模拟和计算物质科学研究中最流行的商用软件之一。源资信息科技（上海）有限公司是 VASP (MedeA) 软件在国内获得授权的独家代理商。如有需求，请联系源资公司（联系方式见后）获取详细信息。

- **培训对象：**

深腾 7000 及网格用户、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。

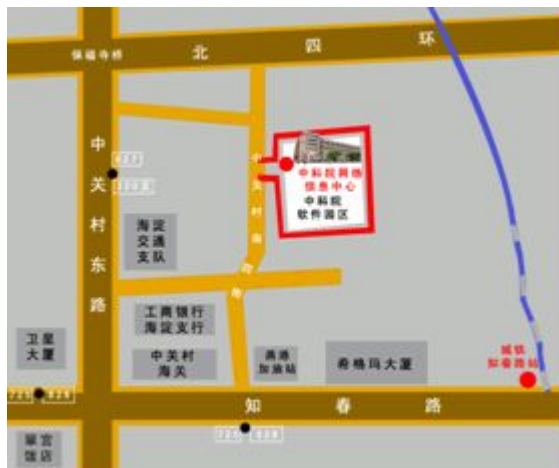
- **培训时间：**

2014 年 7 月 22~24 日。

- **培训地点：**

中国科学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**

科研单位学员：¥1800 元/人

企业单位学员：¥2500 元/人

- **报名方式：**

本次培训班名额已满，请关注进一步消息。

- **付款信息**

**电汇（推荐）：**截止日期 2014 年 7 月 13 日（含）。汇款时请注明“超算计算化学培训”，凭汇款单在签到时领取发票（发票项目：培训费），请在回执中填写正确的发票单位名称。

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：0200 0496 0920 0016 431

**现场付款：** 签到当天可以用现金或支票付款，发票在培训期内发放

- **培训日程安排**

注册时间：2014 年 7 月 22 日 8：00 ~10:00

注册地点：中科院计算机网络信息中心 2 号楼五层大厅

培训时间：上午：9：00~12：00，下午：13：30~17：00

食宿安排：授课期间提供工作午餐，住宿自理

注意事项：提供无线上网进行上机实践，**请学员自备电脑**；

日期	时间	课程内容*	主讲人
7月22日 星期二	8: 00—9: 00	培训注册（地点：中科院网络中心5层会议室大厅）	
	9: 00—9: 20	开幕式	聂宁明副研
	9: 20—10: 20	第一讲：科学计算环境介绍及 VASP 编译	李震宇教授
	10: 20—10: 40	集体照、休息	
	10: 40—12: 00	第二讲：电子结构理论——Hartree-Fock、DFT 理论	李震宇教授
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—14: 00	中科院超级计算环境介绍（一）	刘飞工程师
	14: 00—15: 00	第二讲：电子结构理论——交换关联泛函、准粒子模型、半经验电子结构模型	李震宇教授
	15: 00—15: 15	休息	
	15: 15—16: 00	第三讲：电子结构算法——单电子方程的离散化	李震宇教授
	16: 00—17: 00	上机实践	助教
7月23日 星期三	9: 00—10: 00	第三讲：电子结构算法——自洽场、赝势	李震宇教授
	10: 00—10: 15	休息	
	10: 15—11: 15	第四讲：电子结构分析——电荷密度、单电子轨道相关	李震宇教授
	11: 15—12: 00	上机实践	助教
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—14: 00	MedeA 材料计算平台软件介绍	源资公司
	14: 00—14: 30	中科院超级计算环境介绍（二）	曹荣强副研究员
	14: 30—15: 30	第四讲：电子结构分析——总能相关、常见可视化工具	李震宇教授
	15: 30—15: 45	休息	
	15: 45—16: 45	第五讲：分子模拟——热力学平均与统计系综、Monte Carlo 模拟	李震宇教授
16: 45—17: 00	参观机房		

7月24日 星期四	9:00—10:00	第五讲：分子模拟——分子动力学模拟、 反应动力学	李震宇教授
	10:00—10:15	休息	
	10:15—12:00	第六讲：计算谱学——原子振动、电子激 发、电子输运、化学位移	李震宇教授
	12:00—13:30	午餐	
	13:30—15:00	上机实践	助教
	15:00—15:15	休息	
	15:15—17:00	上机实践及问答环节	助教

● 乘车路线：

- ◇ 首都机场：机场巴士（首都机场—中关村）终点（即四环保福寺桥）下车，换乘公交 641、619 路到海淀交通支队站下车；或乘机场快线轻轨到三元桥站，换乘地铁 10 号线西行到知春路站下车；
- ◇ 北京西站：公交 319 路到海淀交通支队站下车；
- ◇ 北京站：地铁 2 号线到西直门站，换乘城铁 13 号线到知春路站下车。
- ◇ 北京南站：4 号线到海淀黄庄站，换乘 10 号线东行到知春路站下车。

附近公交站点：海淀交通支队、知春里东；地铁站点：知春路站

具体路线请查询：<http://www.bjbus.com/index.htm>

● 住宿推荐：

宾馆名称	联系电话	地址	备注
物科宾馆	010-82649482	中关村南三街 8 号 (中国科学院物理所院内)	需提前预订； 步行时间：15 分钟之内。
天创宾馆	010-51192000	中关村南一条甲 1 号	需提前预订； 步行时间：10 分钟之内。
康拓宾馆	010-68378288 010-62634975	中关村南一条甲 4 号	需提前预订； 步行时间：10 分钟之内
中国科学院	010-62582916	中关村南二条甲 1 号	需提前预订；

空间会议中心			步行时间：8 分钟之内
青年公寓 2 号楼地下招待所	010-82680799	中关村东路 80 号 (中国科学院研究生院青年公寓)	需提前预订； 步行时间：8 分钟之内

注：以上宾馆需自行预定

● VASP 软件支持：

021-32504385 / 010-56706909, support@tri-ibitech.com.cn, 李玮琨博士

附：

winscp421setup.exe 下载

PUTTY.EXE 下载