

## 2017 年 NWCHEM 软件讲习班第一轮通知

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，中国科学院计算机网络信息中心、中国科学院应用科学研究中心、中国科学院上海应用物理研究所、清华大学将于**2017年6月21~23日**在**北京**联合举办2017年NWCHEM软件讲习班。

本次培训将面向 NWCHEM 软件广大用户，本着“理论指导实践、学以致用、加强交流”的原则，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。

NWCHEM 软件是由美国能源部西北太平洋国家实验室（Pacific Northwest National Laboratory，简称 PNNL）下属的环境分子科学研究室（Environmental Molecular Sciences Laboratory，简称 EMSL）负责开发的用于量子化学和分子动力学计算的程序包。NWCHEM 设计之初即是针对高性能并行系统开发，从上世纪 90 年代以来，受到了越来越多科学家的青睐。它可以运行在高性能并行超级计算机和通常工作站集群上，在大多数计算平台上都可以使用，最新版本为 6.6。

- **培训对象：**

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：**

2017 年 6 月 21 日~23 日，报名截止时间：**2017 年 6 月 15 日**，名额有限，报名从速。

- **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

**上机实践请自带笔记本电脑**

- **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

**2017年5月30日之前报名并汇款的学员，培训费用每人优惠300元。**

● **报名方式:**

按照报名回执表的要求填写各项内容，并发至联系人邮箱即可，我们将在一个工作日之内给予回复。

张老师，010-58812131，zhangbh@cnic.cn

● **付款信息**

**电汇(推荐):** 截止日期2017年6月15日(含)。**汇款时请注明“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

● **拟定培训日程(详见课程安排,如有变更,请以实际培训为准):**

日期	时间	安排	主讲人
6月21日	8:00-9:00	注册	
	9:00-9:20	开幕式及计算环境介绍	CNIC
	9:20-10:10	量化计算基本原理介绍	熊孝根
	10:10-10:30	集体照、休息	
	10:30-12:00	量化计算基本原理介绍	熊孝根
	12:00-13:30	午餐	
	13:30-14:00	中科院超算环境介绍	CNIC
	14:00-15:15	NWCHEM基本原理及使用	熊孝根
	15:15-15:30	休息	
	15:30-17:00	上机实践	清华&CNIC
6月22日	9:00-10:30	Ground State with HF and DFT	熊孝根
	10:30-10:45	休息	
	10:45-12:00	Excited States with TDDFT	熊孝根

	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—15: 00	上机实践	清华&CNIC
	15: 00—15: 15	休息	
	15: 15—17: 00	上机实践	清华&CNIC
6月23日	9: 00—10: 30	Electron-Correlation Methods for Ground and Excited states	熊孝根
	10: 30—10: 45	休息	
	10: 45—12: 00	Relativity, Properties and the EMSL Basis Set Library	熊孝根
	12: 00—13: 30	午餐	
	13: 30—15: 00	上机实践	清华&CNIC
	15: 00—15: 15	Coffee Break	
	15: 15—17: 00	上机实践及讨论	清华&CNIC

● **主讲老师介绍:**

熊孝根简历:

2013年获清华大学化学系博士学位, 师从李隽教授和 Pekka Pykkö 教授进行过渡金属配合物和团簇的量子化学计算研究。

现就职于中国科学院上海应用物理研究所任助理研究员。

2016 年获得日本学术振兴会(JSPS)资助赴日本分子科学研究所跟随 Takeshi Yanai 教授进行量化理论的程序开发。

主要研究方向:

过渡金属及镧系和锕系化合物的电子结构计算及化学成键、波函数和密度泛函理论的方法开发等。

● **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 601、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:** 地铁 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。
北京恒兴商务酒店	010-62629988	中关村东路 89 号恒兴大厦内 (近保福寺桥)	需提前预订; 步行时间: 10 分钟之内
如家精选酒店 (北京中关村东路店)	010-82121666	北京海淀区中关村东路 106 号	需提前预订; 步行时间: 15 分钟之内
洲洋宾馆知春路店	010-62623199	海淀区知春路丙 18 号 (紫金数码园对面)	需提前预订; 步行时间: 10 分钟之内

注: 以上宾馆需自行预定

● **报名回执表**

姓名	性别	工作单位	职务/职称	办公电话	手机	E-mail	开发票单位名称	备注

注: 各个字段都是必填项, 请正确填写, 以便联络, 谢谢!