**第一性原理计算软件技术参数**

1.可计算几何性质、电子性质、状态方程和力学性质、表面性质、光学性质、磁学性质、材料激发态（GW准粒子修正）。

2.支持从头分子动力学模拟并能够采用one-shot采样或蒙特卡洛采样法，精确计算电子-声子耦合。

3.使用的是平面波基组，电子与原子核之间的相互作用使用投影缀加波贋势（PAW）方法描述，具有完备的PAW赝势。

4.支持Machine Learning机器学习方法训练生成适合软件分子动力学的力场文件。

5.支持scaLAPACK大尺度快速计算，提供ACFDT-RPA方法，计算大体系（包括半导体、绝缘体、金属等）精确能量。

6.能够实现大规模的高效率并行计算，支持多核多节点并行计算，对核数和节点数均没有限制，支持单用户多用户同时使用。

7.软件为学术课题组版，包含6个注册用户，3年之内小版本免费升级。

8.项目预算金额75000元。