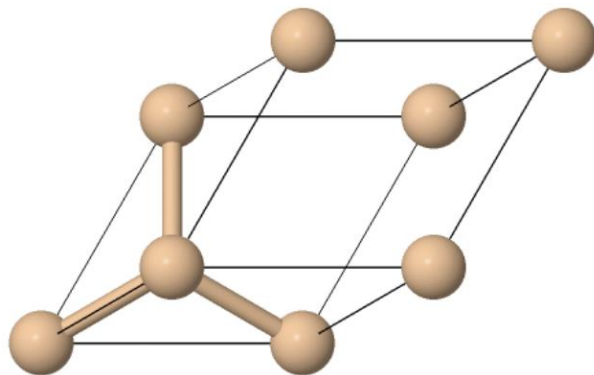


计算速度测试

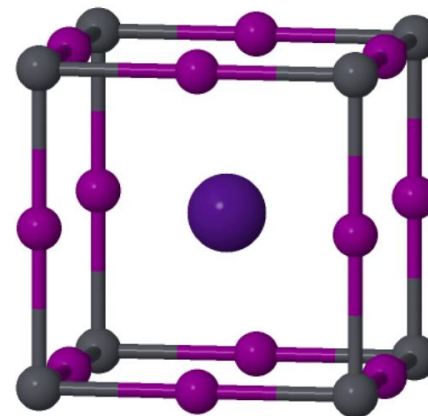
2022.8.30

北京龙讯旷腾科技有限公司

1、小体系计算



Si原胞结构图

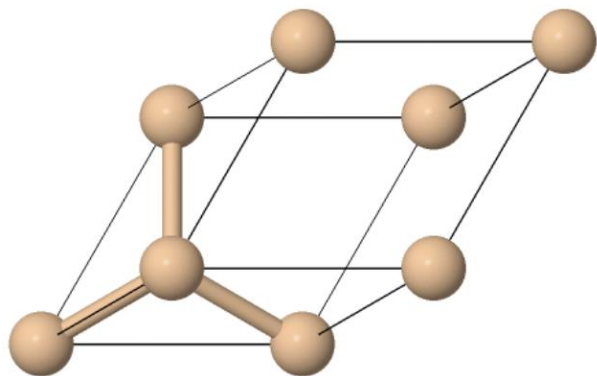


CsPbI₃结构图

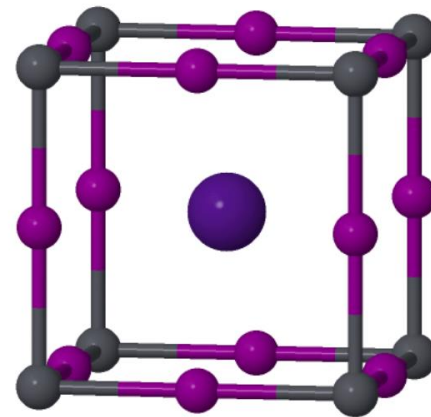
结构优化与自洽计算

| 测试体系 | 计算类型 | 晶格常数 | | 原子数/ 电子数 | 使用资源 | 截断能 | k点数/ k点网格 | 消耗时间 | |
|--------------------|------|--------------------|--------------------|-------------|----------|-------|--------------|--------|---------|
| | | PBE泛函 | HSE泛函 | | | | | PBE泛函 | HSE泛函 |
| Si | 结构优化 | a=3.86Å b=3.86Å | a=3.85Å b=3.85Å | 2/8 | 4*3080Ti | 950eV | 35/9 9 9 | 53s | 22min |
| | 自洽计算 | c=3.86Å | c=3.85Å | | | 680eV | | 8s | 2min26s |
| CsPbI ₃ | 结构优化 | a=6.39Å b=6.39Å | a=6.35Å b=6.35Å | 5/74 | 4*3080Ti | 950eV | 10/5 5 5 | 1min2s | 15min |
| | 自洽计算 | c=6.39Å | c=6.35Å | | | 680eV | | 14s | 3min30s |

注：本算例结构优化时进行原子位置优化和晶格优化；所有算例均使用SG15赝势



Si原胞结构图

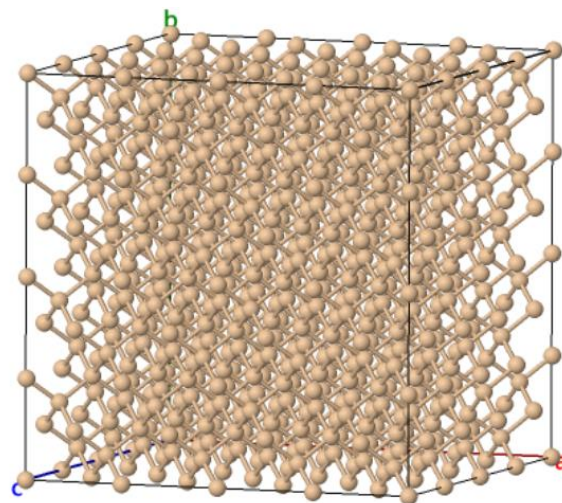


CsPbI₃结构图

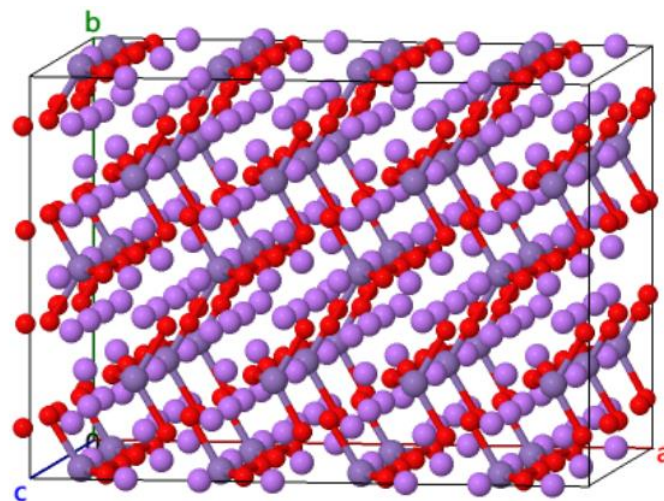
能带计算

| 测试体系 | 原子数/ 电子数 | 使用资源 | 截断能 | k点数 | 消耗时间 | | 计算带隙 | | 实验带隙 |
|--------------------|-------------|----------|-------|-----|-------|-------|--------|--------|--------|
| | | | | | PBE泛函 | HSE泛函 | PBE泛函 | HSE泛函 | |
| Si | 2/8 | 4*3080Ti | 680eV | 136 | 12s | 22min | 0.58eV | 1.17eV | 1.12eV |
| CsPbI ₃ | 5/74 | 4*3080Ti | 680eV | 74 | 37s | 11min | 1.40eV | 1.93eV | 1.7eV |

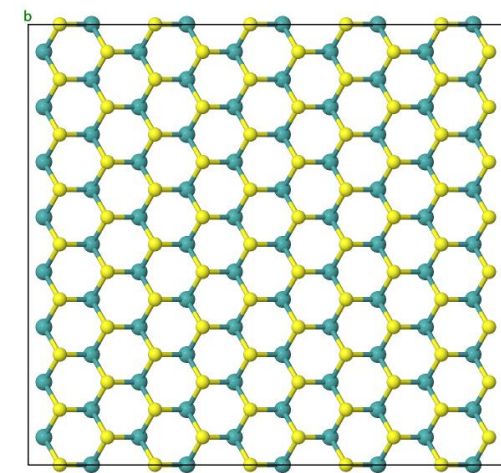
2、大体系HSE自洽计算



Si超胞结构图



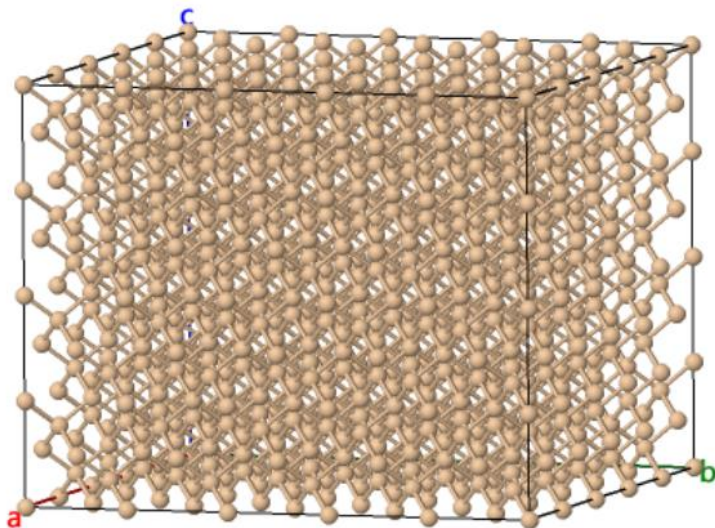
Li₉₅Mn₁₆O₆₄超胞结构图



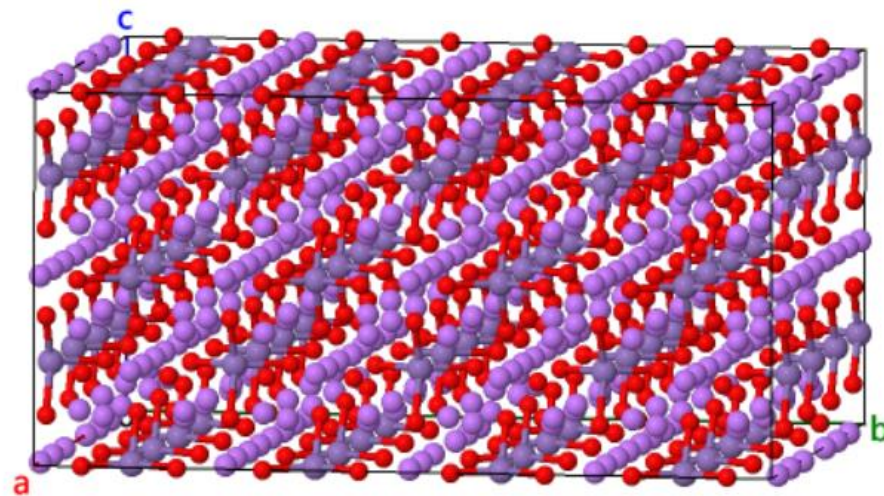
单层MoS₂超胞结构图

| 测试体系 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 截断能 | k点数/k点网格 | 使用资源 | 消耗时间 |
|---|----------------------------------|----------|-------|----------|----------|-------|
| Si | a=21.77Å b=21.77Å c=21.77Å | 512/2048 | 680eV | 单G点 | 4*3080Ti | 54min |
| | | | | | 8*3080Ti | 28min |
| Li ₉₅ Mn ₁₆ O ₆₄ | a=18.89Å b=13.42Å c=13.44Å | 350/1818 | 680eV | 单G点 | 4*3080Ti | 17min |
| | | | | | 8*3080Ti | 13min |
| 单层MoS ₂ | a=27.43Å b=25.34Å c=15.13Å | 240/1440 | 680eV | 单G点 | 4*3080Ti | 57min |
| | | | | | 8*3080Ti | 30min |

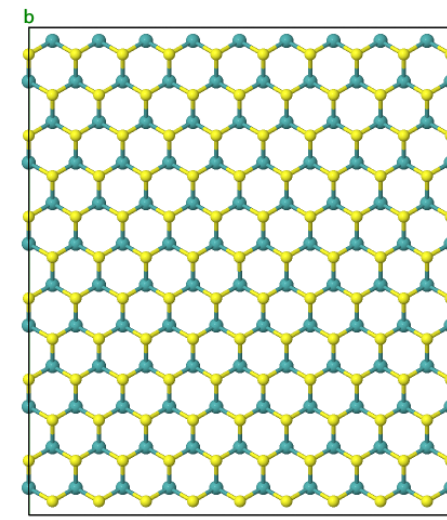
3、大体系PBE自洽计算



Si超胞结构图

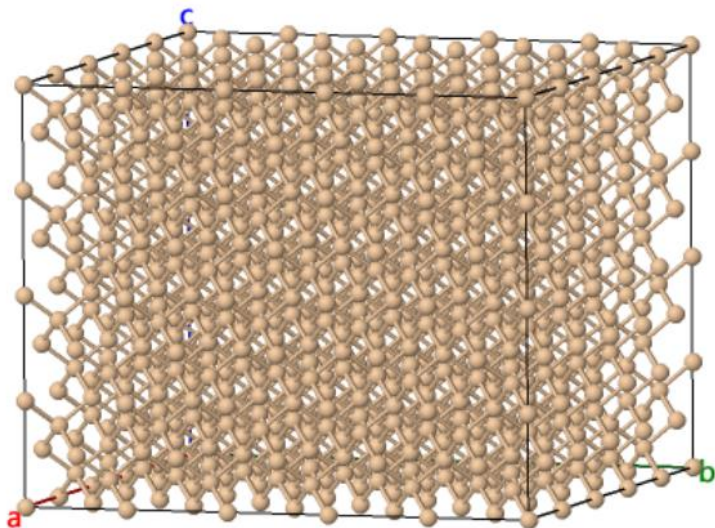


Li₉₅Mn₁₆O₆₄超胞结构图

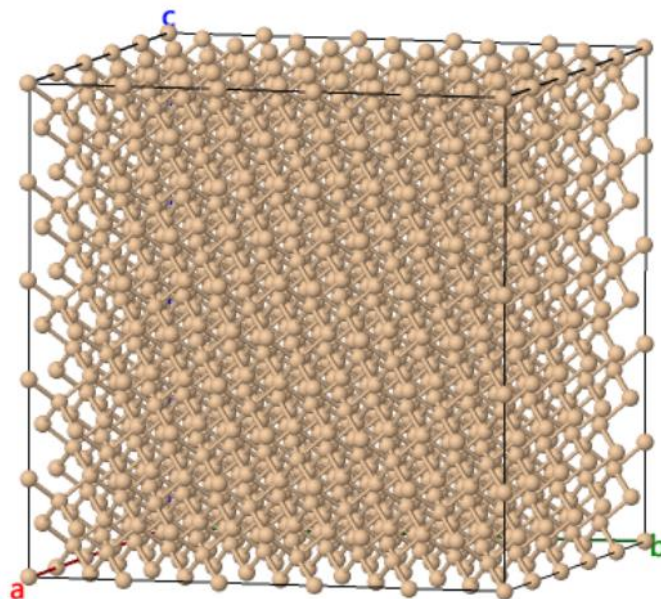


单层MoS₂超胞结构图

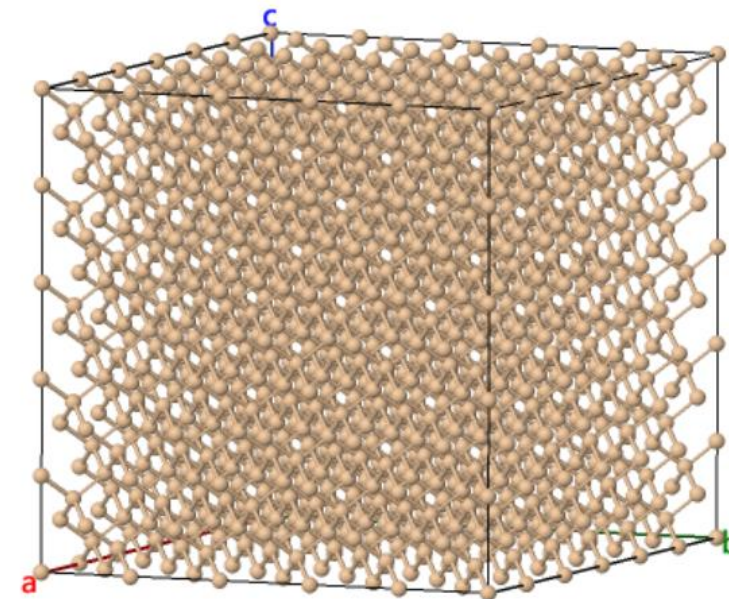
| 测试体系 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 截断能 | k点数/k点网格 | 使用资源 | 消耗时间 |
|---|----------------------------------|----------|-------|----------|----------|-------|
| Si | a=27.32Å b=27.32Å c=21.85Å | 800/3200 | 680eV | 单G点 | 4*3080Ti | 11min |
| | | | | | 8*3080Ti | 6min |
| Li ₉₅ Mn ₁₆ O ₆₄ | a=18.89Å b=26.84Å c=13.44Å | 700/3636 | 680eV | 单G点 | 4*3080Ti | 24min |
| | | | | | 8*3080Ti | 17min |
| 单层MoS ₂ | a=27.43Å b=25.34Å c=15.13Å | 324/1944 | 680eV | 单G点 | 4*3080Ti | 11min |
| | | | | | 8*3080Ti | 7min |



Si超胞结构图(800原子)

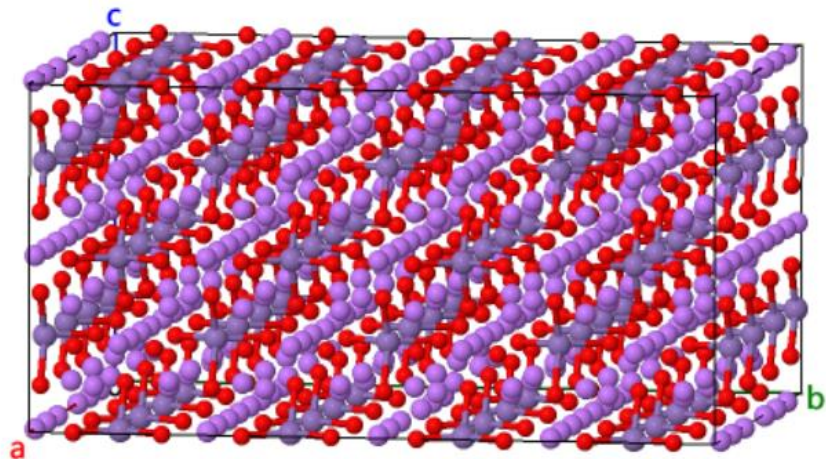


Si超胞结构图(1000原子)

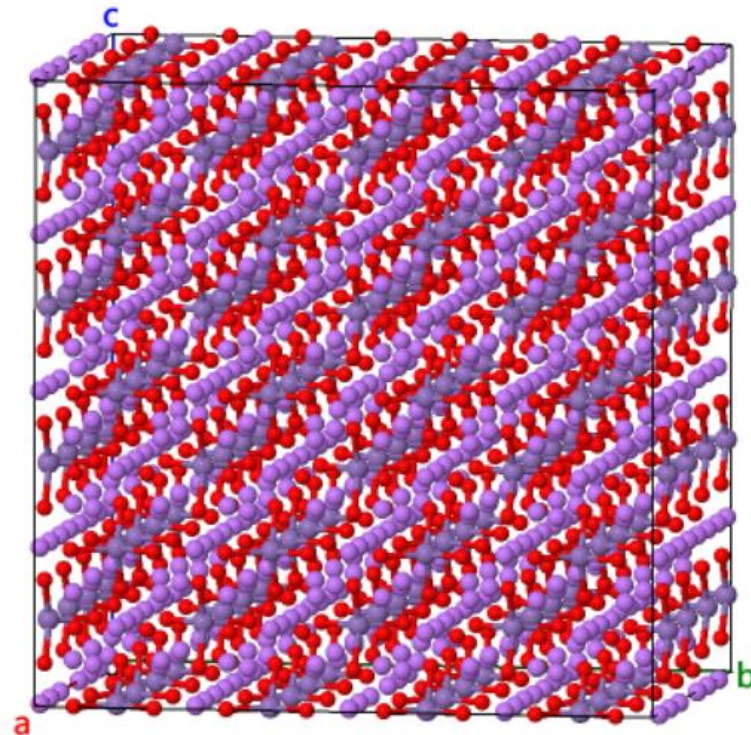


Si超胞结构图(1200原子)

| 测试体系 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 截断能 | k点数/k点网格 | 使用资源 | 消耗时间 |
|------|----------------------------------|-----------|-------|----------|--------|-------|
| Si | a=27.32Å b=27.32Å c=21.85Å | 800/3200 | 680eV | 单G点 | 4*3090 | 11min |
| Si | a=27.32Å b=27.32Å c=27.32Å | 1000/4000 | 680eV | 单G点 | 4*3090 | 18min |
| Si | a=32.81Å b=27.32Å c=27.32Å | 1200/4800 | 680eV | 单G点 | 4*3090 | 28min |



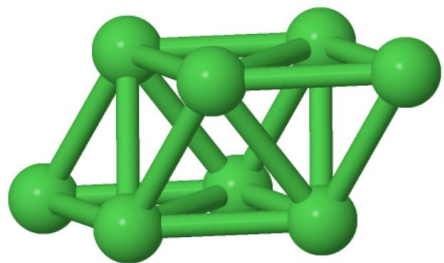
Li₉₅Mn₁₆O₆₄超胞结构图(700原子)



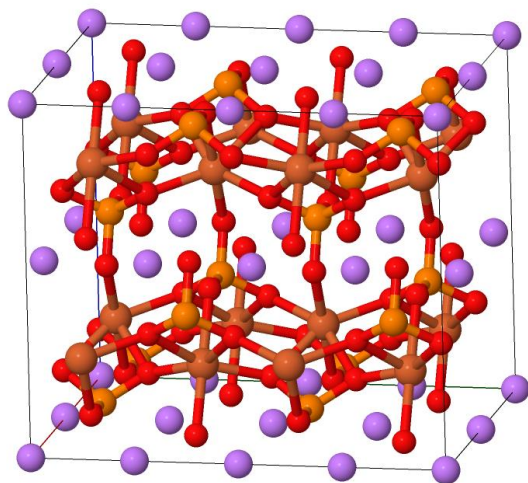
Li₉₅Mn₁₆O₆₄超胞结构图(1400原子)

| 测试体系 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 截断能 | k点数/k点网格 | 使用资源 | 消耗时间 |
|---|----------------------------------|-----------|-------|----------|--------|---------|
| Li ₉₅ Mn ₁₆ O ₆₄ | a=18.89Å b=26.84Å c=13.44Å | 700/3636 | 680eV | 单G点 | 4*3090 | 23min |
| Li ₉₅ Mn ₁₆ O ₆₄ | a=18.89Å b=26.84Å c=26.88Å | 1400/7272 | 680eV | 单G点 | 4*3090 | 1h28min |

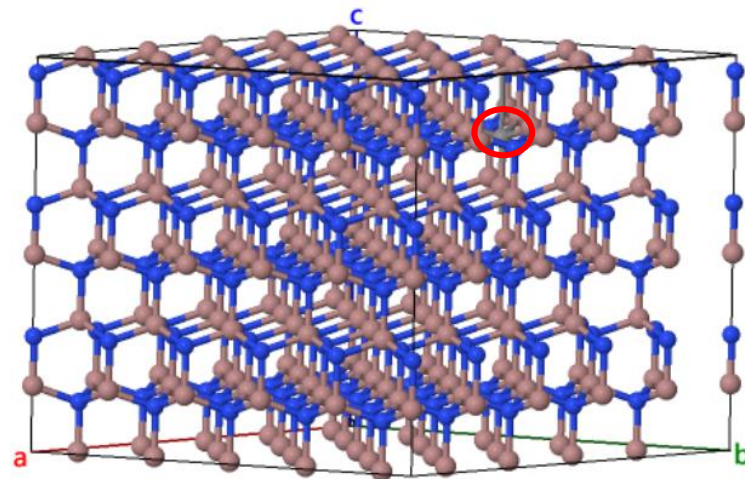
4、PBE+自旋极化自洽计算



Ni原胞结构图



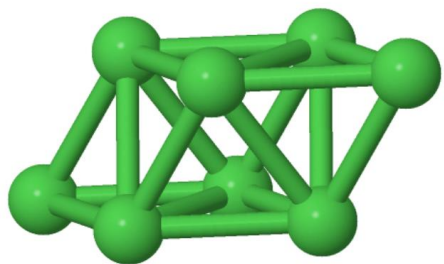
$\text{Li}_{16}\text{Fe}_{16}\text{P}_{16}\text{O}_{64}$ 结构图



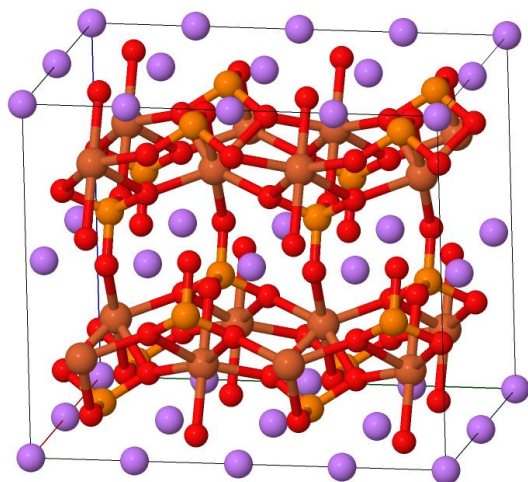
GaN_{CN} 结构图

| 测试体系 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 使用资源 | 截断能 | k点数/k点网格 | 消耗时间 |
|--|----------------------------------|----------|----------|-------|----------|------|
| Ni | a=2.48Å b=2.48Å c=2.48Å | 1/18 | 4*3080Ti | 680eV | 35/9 9 9 | 22s |
| $\text{Li}_{16}\text{Fe}_{16}\text{P}_{16}\text{O}_{64}$ | a=9.60Å b=12.49Å c=10.41Å | 112/768 | 4*3080Ti | 680eV | 4/2 1 2 | 9min |
| GaN_{Nc} | a=16.04Å b=16.04Å c=15.68Å | 300/2699 | 4*3080Ti | 680eV | 单G点 | 8min |

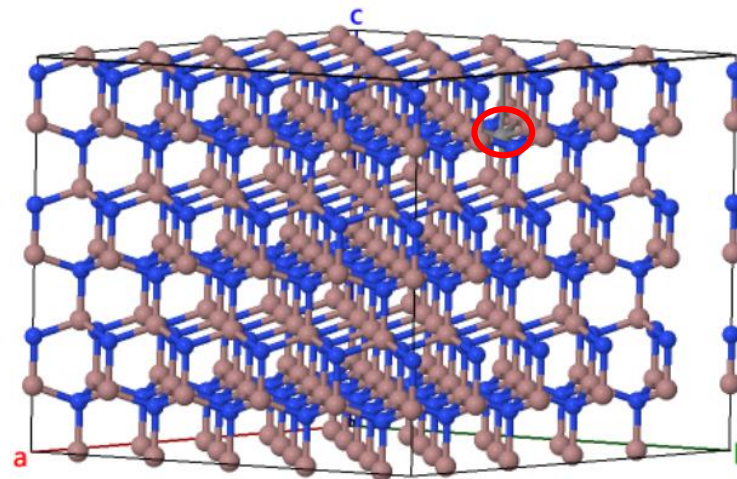
5、HSE+自旋极化自洽计算



Ni原胞结构图



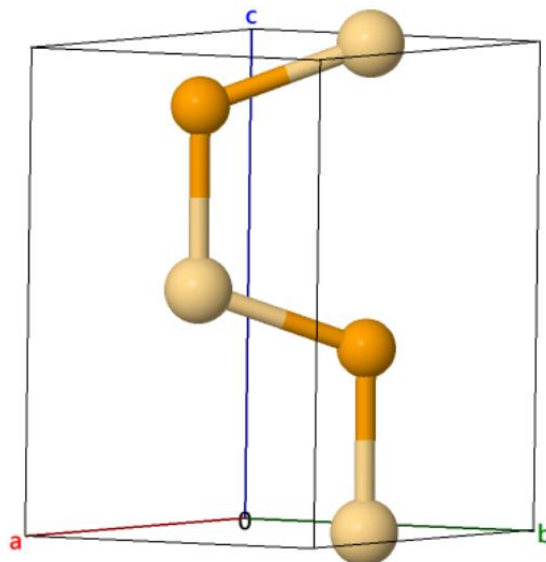
$\text{Li}_{16}\text{Fe}_{16}\text{P}_{16}\text{O}_{64}$ 结构图



GaN_{CN} 结构图

| 测试体系 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 使用资源 | 截断能 | k点数/k点网格 | 消耗时间 |
|--|----------------------------------|----------|----------|-------|----------|-------|
| Ni | a=2.48Å b=2.48Å c=2.48Å | 1/18 | 4*3080Ti | 680eV | 35/9 9 9 | 7min |
| $\text{Li}_{16}\text{Fe}_{16}\text{P}_{16}\text{O}_{64}$ | a=9.60Å b=12.49Å c=10.41Å | 112/768 | 4*3080Ti | 680eV | 4/2 1 2 | 24min |
| GaN_{Nc} | a=16.04Å b=16.04Å c=15.68Å | 300/2699 | 4*3080Ti | 680eV | 单G点 | 32min |

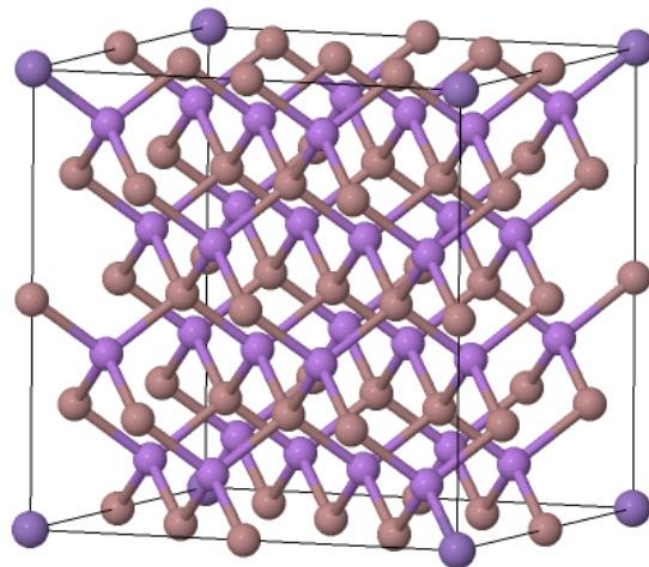
6、自旋轨道耦合自治计算



CdSe结构图

| 测试体系 | 泛函 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 使用资源 | 截断能 | k点数/k点网格 | 消耗时间 |
|------|-----|-------------------------------|---------|----------|-------|----------|-------|
| CdSe | PBE | a=4.39Å b=4.39Å c=7.16Å | 4/52 | 4*3080Ti | 680eV | 16/7 7 3 | 20s |
| | HSE | | | | | | 23min |

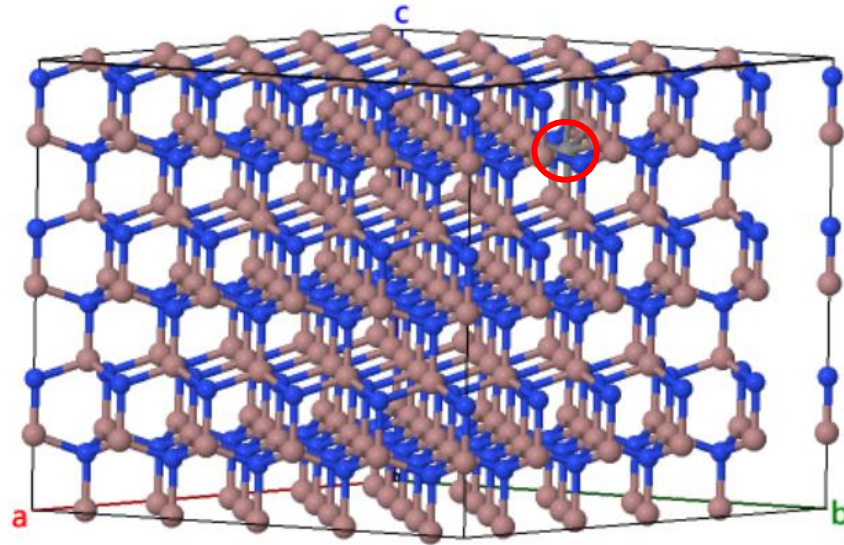
7、非线性磁矩+自旋轨道耦合自洽计算



GaAs_MnGa结构图

| 测试体系 | 泛函 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 使用资源 | 截断能 | k点数/k点网格 | 消耗时间 |
|-----------|-----|----------------------------------|---------|----------|-------|----------|---------|
| GaAs_MnGa | PBE | a=11.50Å b=11.50Å c=11.50Å | 64/578 | 4*3080Ti | 680eV | 8/2 2 2 | 12min |
| | HSE | | | | | | 6h15min |

8、带电体系结构优化

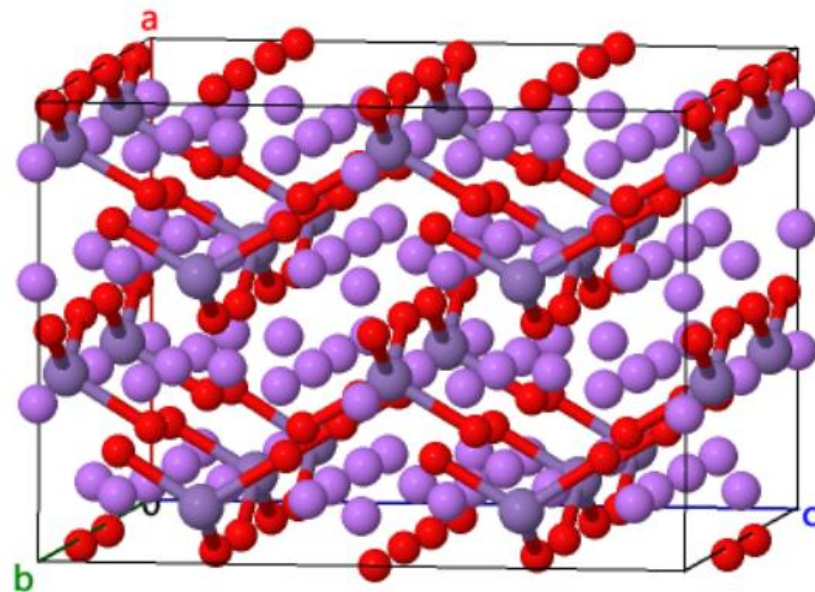


GaN_C_N结构图

| 测试体系 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 使用资源 | 截断能 | k点数/k点网格 | 消耗时间 |
|------------------------|----------------------------------|----------|----------|-------|----------|---------|
| GaN_C _N -1e | a=16.04Å b=16.04Å c=15.68Å | 300/2698 | 4*3080Ti | 950eV | 单G点 | 1h48min |
| GaN_C _N +1e | a=16.04Å b=16.04Å c=15.68Å | 300/2700 | 4*3080Ti | 950eV | 单G点 | 2h5min |

注：本算例结构优化时只进行原子位置优化，不进行晶格优化

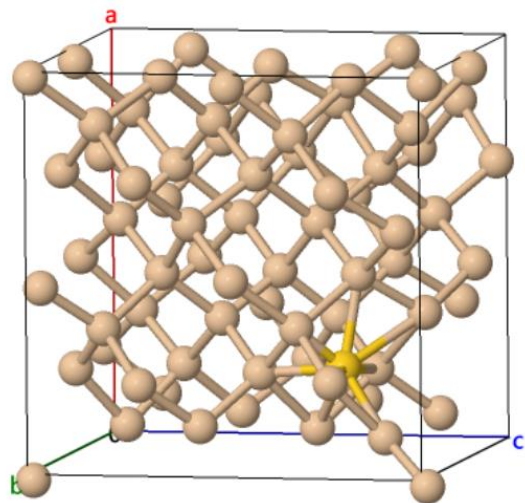
9、从头算分子动力学计算



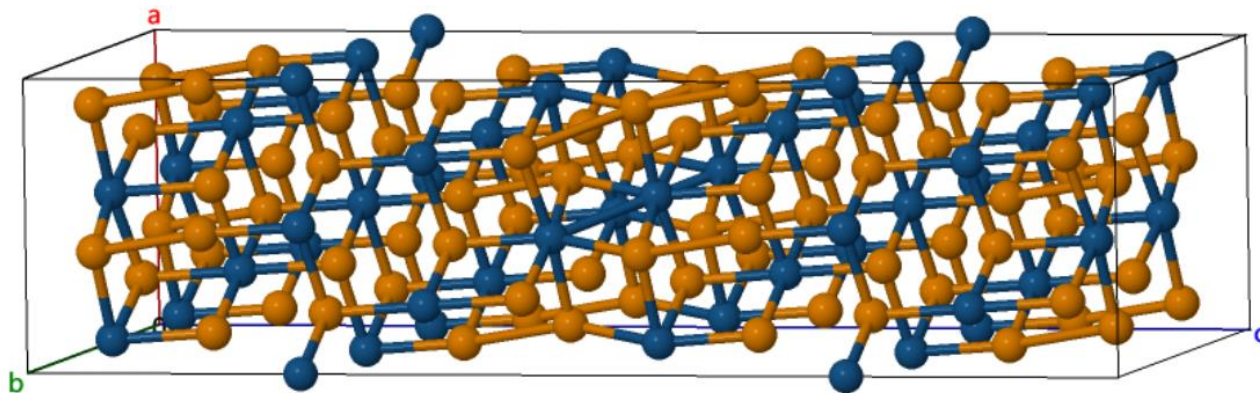
Li₉₅Mn₁₆O₆₄结构图

| 测试体系 | 测试项目 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 使用资源 | 测试步数 | 截断能 | k点 | 消耗时间 |
|---|----------------------|---------------------------------|---------|----------|------|-------|-----|---------|
| Li ₉₅ Mn ₁₆ O ₆₄ | MD (Nose-Hoover NVT) | a=9.44Å b=13.42Å c=13.44Å | 175/909 | 4*3080Ti | 1000 | 680eV | 单G点 | 5h6min |
| Li ₉₅ Mn ₁₆ O ₆₄ | MD (Nose-Hoover NVT) | a=9.44Å b=13.42Å c=13.44Å | 175/909 | 4*3090 | 1000 | 680eV | 单G点 | 5h11min |

10、含时密度泛函计算



Si₆₄Au结构图



Te₈₀Ir₄₀结构图

| 测试体系 | 测试项目 | 晶格常数 | 原子数/电子数 | 使用资源 | 测试步数 | 截断能 | k点 | 消耗时间 |
|-----------------------------------|--------------------|----------------------------------|---------|----------|-------|-------|-----|-----------|
| Si ₆₄ Au | TDDFT | a=10.86Å b=10.86Å c=10.86Å | 65/275 | 4*3080Ti | 6000 | 680eV | 单G点 | 5h22min |
| Te ₈₀ Ir ₄₀ | TDDFT+光场 | a=7.91Å b=13.31Å c=28.87Å | 120/840 | 4*3080Ti | 10000 | 610eV | 单G点 | 81h24min |
| Te ₈₀ Ir ₄₀ | TDDFT+光场+ 载流子冷却 | a=7.91Å b=13.31Å c=28.87Å | 120/840 | 4*3080Ti | 10000 | 610eV | 单G点 | 100h16min |