

Table of Contents

| | |
|--------------------------------------|---|
| QuantumATK的使用许可 License | 1 |
| 功能模块 | 1 |
| 使用许可 | 2 |
| 版本比较 | 2 |

QuantumATK的使用许可License

使用 QuantumATK 进行计算和发表结果时需要授权许可License。用户可以使用短时间的演示版、试用版许可来测试 QuantumATK 的全部功能，但是为了一直使用软件，用户需要购买许可。本文解释 QuantumATK 许可的内容和含义。



为了保证您的权益，请勿发表用试用版获得的结果。为避免争议，请购买正版软件使用权。

功能模块

QuantumATK 是一个模块化的平台产品。目前需要购买许可的模块包括：

| 模块 | 功能概述 | 详细介绍 | |
|-----|-------------------------------|--|------------------------------------|
| 1 | 量子力学计算引擎 | 支持使用以下方法进行块体材料、分子性质的计算模拟 | |
| 1.1 | DFT-LCAO | 成熟的密度泛函理论计算方法，可以研究电子态、结构、输运性质 | 详细介绍 |
| 1.2 | DFT-PlaneWave | 自主开发的平面波 DFT 程序，支持 PAW 势 | 详细介绍 |
| 1.3 | SemiEmpirical | 半经验量子力学方法，可以更好、更快的计算超大体系 | 详细介绍 |
| 2 | 经验力场计算引擎 | 原子间相互作用势（力场）计算方法 | |
| 2.1 | ForceField | 经验力场计算引擎，内含丰富的力场参数，可自定义力场参数。用于能量计算、结构优化、声子等。 | 详细介绍 |
| 3 | NEGF 器件模拟 | 最受欢迎的器件体系模拟的功能，支持原子级别的电子器件模型One-Probe 材料表面模型Two-Probe 材料界面模型 | 查看NEGF方法模拟表面与界面的优势 |
| 4 | 并行计算DP | 对量子力学和经验力场计算的并行支持 | |
| 5 | NanoLab 图形用户界面 | 集成化的图形用户界面，支持建模、计算设置、作业提交和结果分析。 | 详细介绍 |
| 5.1 | DataBase | 数据库接口，支持直接在线检索 Materials Project 和 Crystallography Open DatabaseCOD晶体结构和性质数据库。 | 详细介绍 |
| 5.2 | NanoLab Links | 第三方案程序接口，支持VASP等第三方计算程序。 | 详细介绍 |
| 6 | Sentaurus Materials Workbench | 为半导体和电子学材料提供的自动化的性质计算模拟套件 | |

此外，凡新购 QuantumATK 的用户还将获赠以下功能（通过 NanoLab Links 实现）：

- VASP 接口：用于设置 VASP 计算以及分析 VASP 计算结果（在 NanoLab 图形界面中使用 VASP 进行计算）
- QuantumEspresso 接口：用于设置 Quantum Espresso 计算以及分析 Quantum Espresso 计算结果（NanoLab 用作 Quantum Espresso 计算的图形用户界面）
- LAMMPS 接口：用于导入 LAMMPS 计算结果并进行分析（在 NanoLab 中分析 LAMMPS 轨迹文件）

使用许可

浮动许可

QuantumATK的许可为用户自由使用软件提供最大便利，并不对用户如何使用软件进行限制，例如不需要把软件安装在指定的计算机上，也不限制是Windows还是Linux操作系统。唯独受到限制的是同时并发运行的图形界面个数、同时运行的DFT/SE计算作业数和同时运行的ForceField计算作业个数。这种许可管理方式称为浮动许可，是使用许可服务器实现的。许可服务器安装并绑定在一台计算机上，其他计算机可以通过网络访问服务器借取和归还许可。

许可计数

QuantumATK使用许可对图形用户界面、NanoLab和NanoLab Links、计算模块、Master或Master-NEGF、Master-forcefield、并行进程数、Dp等几项功能进行了限制。

- Master/Master-negf支持 DFT-LCAO、DFT-PlaneWave或 SemiEmpirical 模块可以同时进行计算的总作业数；
- Master-forcefield支持 ForceField 模块可以同时进行计算的总作业数；
- DP支持所有同时运行的计算作业的 MPI 并行进程的总数、QuantumATK支持 MPI 并行计算，这可以大大提高计算速度（具体参见[QuantumATK并行计算](#)）
- NanoLab支持同时打开的图形用户界面的个数。

维护期限

软件许可附有维护期，用户在维护期限内可以：

- 获得软件的更新版本（包括问题修复和功能增强）；
- 获得包含软件下载、安装、使用过程中的技术支持。

对于学术研究小组用户、QuantumATK各模块按照固定的套装销售，价格更加优惠，具体情况请咨询[费米科技](#)

版本比较

| 版本 | 许可机制 | NanoLab 图形界面 | DFT-LCAO/DFT-PlaneWave/ SemiEmpirical计算 | ForceField 计算 | NEGF 器件模拟 |
|--------------------------|------|--------------|---|---------------|-----------|
| QuantumATK+NEGF材料与器件模拟平台 | 多机浮动 | 支持 | 支持 | 支持 | 支持 |
| QuantumATK材料模拟平台 | 多机浮动 | 支持 | 支持 | 支持 | 不支持 |

From:

<https://www.fermitech.com.cn/wiki/> - 费米维基

Permanent link:

https://www.fermitech.com.cn/wiki/doku.php?id=atk:atk-vnl%E7%9A%84%E4%BD%BF%E7%94%A8%E8%AE%B8%E5%8F%AF_license

Last update: **2021/01/05 10:18**