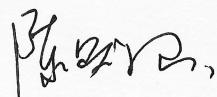


# 关于“电子尺度软件模块开发与应用”项目委托中国科学院物理研究 所测试的说明

鉴于中国科学院物理研究所在计算物理方面经验丰富，加之本人之前也与该研究所的任新国老师一起合作发表过文章“Role of exact exchange in the structural and electronic properties of the  $\alpha$  and  $\gamma$  phases of cerium: a densityfunctional theory study” **New J. Phys.**, **24**, 093032 (2022)，故本项目委托中国科学院物理研究所任新国课题小组研究团队对 ABACUS 原子算筹软件的杂化泛函功能进行详细测试，并给出测试报告。本次合同的完成有利于提升 ABACUS 软件的稳定性和易用性，同时也符合工信部对本项目的要求。

项目负责人：  
日期：2023.8.15