

福州·材料-物理-化学计算模拟实用技术研修班邀请函

福建·福州

(按需开展线上/线下教学,早学早用,人数不限少)

春季班: 3月 21-24日; 初夏班: 5月 1-4日; 秋季班: 11月 5-8日

暑期班: 7月 24-30日, 寒假班 1月 15-22日)

主办单位: 福州大学多尺度材料设计与应用实验室 (<https://mcmf.fzu.edu.cn>)

承办单位: 福州博德新材料科技有限公司 (<http://www.bode-tech.cn>)

协办单位: 北京并行科技有限公司 (助您分分钟驶入计算快车道, 24小时在线贴身保驾护航, [点击试用](#))

支持单位: 鸿之微科技(上海)股份有限公司

计算模拟专题培训咨询 QQ 群: 255310306

吴波教授: QQ:654489521@qq.com, 电话: 13023819517 首席教学和科研负责人

吴睿先生: QQ:495502272@qq.com, 电话: 13691685245 博德科技行政副总

注册费: 寒假班, 暑假班 3000元/人 (含 500元机时费, 如学员负责自己的超算资源, 则注册费 2500元)。

春季班; 初夏班; 秋季班; 2500元/人) (含 500元机时费, 如学员负责自己的超算资源, 则注册费 2000元)。

近 10 年来, 几乎所有高质量的科研工作都迫切需要将试验研究和计算模拟结合起来。基于原子、电子层次的第一性原理计算模拟, 发展和普及得异常迅速, 出现多款物美价廉, 功能强大的计算模拟软件包, 如 **VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)**, 它使用赝势和平面波基组, 进行第一性原理计算, 采用周期性边界条件 (或超原胞模型) 处理原子、分子、晶体、团簇、纳米线/管、薄膜、界面、异质结、表面、准晶和无定性材料。当原子初始排列方式 (POSCAR) 给定后, **VASP** 可计算材料的结构参数、电子结构 (能级、电荷密度分布、能带、电子态密度和电子局域分布)、状态方程和力学性质 (弹性模量和弹性常数)、光学性质、磁学性质、晶格动力学性质、激发态。此外, **Material Studio** 和 **MedeA** 等的可视化操作使得第一性原理方法的门槛降低; **ABINIT** 的学习手册细致入微, 也具有很多优秀品质, **Gaussian** 在处理有机分子和无机分子, 包括其真空态和溶剂溶解态, **ORCA** 被称之为量化计算领域的 ‘**VASP**’, **Nanodcal** 在微纳材料与器件模拟领域应用日益成熟, 这些软件包可以融会贯通, 助力材料和化学领域的深入研究。

福州博德新材料科技有限公司为留学回国人员联合业界精英, 创办的一家创业型和创新型新科技公司 (www.bode-tech.cn), 在新材料的计算设计和制备开发方面, 积极开展科技创新和技术服务活动, 近年来建立了“全国材料-物理-化学计算模拟实用技术研修班”, 开展研究式学习与交流, 于每年定期邀请学术造诣和实战经验丰富的主讲教师和特邀讲师, 倾情奉献材料和化学计算模拟经验和技巧。五年来, 参训学员超过 600 人次。学员来源广泛, 来自全国 29 个省、市、自治区及海外, 如北大、清华、厦大、川大、中大、兰大、武大、昆工、科学院、**TDK** 电子公司等众多高校、研究所和企业 (其中香港、美国及日本等有 4 名) 的师生参与学习和研讨。参训学员普遍认为研习内容接地气、实用性和通用性强、信息量大,

效果良好，收获颇丰，不虚此行。部分学员已从最初的入门到熟悉，现已逐渐精通，并发表高水平论文，有的学员经我们牵线搭桥，出国留学了。（资讯备索）。

为了进一步推广和普及材料-物理-化学计算模拟实用技术，使广大材料与化学领域研究者认识和熟悉第一性原理计算方法在材料和化学中的应用，充分掌握相应的软件工具，并利用它分析解决实际科研问题，早买、早学、早用、早出成果，**2023**年在福州继续开设“材料-物理-化学计算模拟实用技术”暑期实战研修班。内容包括简介材料和化学计算模拟背景和案例、物质结构基础和密度泛函理论，在概括介绍第一性原理计算主流软件基础上，主要讲习 **VASP**，次要讲习 **MS** 和 **ABINIT**，**MedeA**，**Gaussian**，**Nanodcal**，分子动力学软件及热力学计算软件 **Thermo-Calc/Pandat**（所有学员原则上应自备版权）。通过软件操作快速入门，计算实战演练，计算结果提取，画图和分析讨论来达到从入门到熟练级别；尤其是细致讲解微结构搭建和计算结果的详细解析，培养学员“工匠精神”，对计算模拟知其然，更能知其所以然。进一步结合基础理论和热门文献，为您讲解和分析 **VASP** 等软件在新材料和化学研究设计中的应用实例；针对参训学员的研究课题，提供指导意见和现场实战演练，使课程更加贴近学员的实际需求。本次讲习准备了丰富实用的内部学习资料、开源小代码或小工具软件、计算案例、热门参考文献、学术小论文构思和撰写模板。讲课力求深入浅出，融会贯通，边讲边练，手把手教，从而扫除初学者（特别是零基础者）对量子力学知识和计算软件的畏惧感和神秘感；对于中、高级用户，通过互动交流，亦有取长补短和提升功效。（第一性原理高级用户若报名参加本活动、愿意分享知识，经过评估，可免注册费）。通过学习和研讨，力求让学员学会并熟练应用第一性原理和材料热力学计算模拟软件计算金属材料、无机材料和有机分子的晶体结构、电子结构、相变、反应、物理和力学等性质，并掌握构思和撰写新材料结构与性能的第一性原理计算模拟学术小论文的方法，提升科研水平。我们相信，经过共同努力和密切配合，广大学员定会获得前所未有的体验和收获！

一、时间、地点及交通指南：

（按需开展线上/线下教学,早学早用，人数不限少）：春季班：**3月21-25日**；初夏班：**5月2-4日**；暑期班：**7月24-30日**；秋季班：**11月5-8日**；寒假班元月**15-22日**）（均提前一天报到），鼓励学员带课题继续自主计算与研究，活动结束后，若有需要，可延长开放场地和计算设施**2天**，主讲教师和助教现场答疑，不再另外收取费用，食宿自理。

地点：福州西海岸广场 **SOHO**（视报名人数，具体地点提前**5天**对报名学员邮件通知）

二、讲习方式：

线上/线下腾讯会议同步进行，课堂集中授课、边讲边练、手把手教、互动研讨、学术报告。现场提供若干计算机供上机实践；也将基于远程云计算模式。亦请学员自备笔记本电脑，进行文献资料解读，计算结果提取、处理与分析，学术论文框架撰写；场地开放时间为每天**8:20-21:30**，计算机可通宵达旦计算。自主上机计算与研究，辅导答疑时间充足。

现场提供张贴展示服务，学员可以就待解决的研究课题或已有亮点工作进行展示交流，借助集体智慧，对课题进行咨询和攻关。A4纸张打印，4页以内，亦欢迎提前发送电子版文件给会务组，利于教学团队提前针对性备课。

本学习和研讨班建有 QQ 学习交流群，为学员提供一个实时辅导答疑、新知传真、互动研讨、永不落幕的电子交流平台和电子教室，接纳参训学员加入，享受免费服务。

三、日程：（以下为暑期班 7 天日程，教学内容将视学员知识结构和需求情况进行调整）

时间	内容	
D1	8:30-9:50	<ul style="list-style-type: none"> ● 开幕 ● 授课内容 1: 新材料计算模拟概貌和实例简介（部分实例将在后续课程实战演练） ● 部分结构和功能材料研究开发实践中的计算模拟需求放送
	9:50-10:10	茶歇，答疑，学员交流
	10:10-10:40	授课内容 2 “创新工作站、服务器和超算系统及行业解决方案”暨 VASP 软件运行的软、硬件环境配置和安装调试
	10:40-11:30	授课内容 3: 物质结构基础和基于密度函数理论的第一性原理（或从头算）理论简介
	11:30-14:30	欢迎午宴、午休
	14:30-15:20	授课内容 4: VASP 软件算例全程实战 1-1: 执行计算 半导体化合物 ZnS-B3, MoS ₂ -C7 的晶体结构、电子结构、弹性、光学等性质计算模拟（提供计算初始文件夹设置，并附上计算完成后的参考文件夹）
	15:20-15:35	茶歇，答疑，学员交流
	15:35-16:25	授课内容 5: VASP 软件算例全程实战 1-2: 计算结果提取、图示和解析---对半导体化合物 ZnS-B3, MoS ₂ -C7 的晶体结构、电子结构、弹性、光学等性质计算模拟，以及结果进行提取、图示和解析。
	16:25-16:40	茶歇，答疑，学员交流
	16:40-17:30	ADD1: Material Studio 材料设计及性质预测平台软件介绍和实战
	19:00-21:30	晚自习上机
D2	8:30-9:20	授课内容 6: VASP 软件核心文件 POSCAR（晶体几何结构格式化描述文件）的构建方法
	9:20-9:35	茶歇，答疑，学员交流
	9:35-10:25	授课内容 7: VASP 软件核心文件 POSCAR 之 DIY 和计算全程 2——构建自己感兴趣的化合物的几何文件（将提供必要的信息）
	10:25-10:40	答疑，学员交流
	10:40-11:30	授课内容 8: 掺杂或合金化计算基础——超晶胞的手工和软件构建
	11:30-14:30	自费用餐、午休
	14:30-15:20	授课内容 9: VASP 软件算例 2 之全程实战 3: Ni 掺杂 ZnS 半导体化合物的晶体结构、电子结构和物理力学性质计算模拟（提供参考模板，体系亦包含 ZnO, CdTe, TiO ₂ 等）
	15:20-15:35	茶歇，答疑，学员交流
	15:35-16:25	授课内容 10: Ni 掺杂 ZnS 半导体化合物的晶体结构、电子结构和物理力学性质计算模拟结果解析和讨论
	16:25-16:40	答疑，学员交流

	16:40-17:30	ADD2: MedeA-VASP 平台与计算模拟模块实例介绍
D3	8:30-9:20	授课内容 11: VASP 软件算例之全程实战 4-1:合金相精细微结构与性质模拟(SmCo_5 基稀土永磁材料, Ti_2AlNb 、多主元高熵合金原子在亚晶格上的占位分数预测, 基于占位分数建模、计算磁性、弹塑性, 催化、扩散, 设计合金(提供参考案例, 基于从头算结果的热力学数据库)
	9:20-9:35	茶歇, 答疑, 学员交流
	9:35-10:25	授课内容 12: VASP 软件算例全程实战 4-2:半金属化合物 CrO_2 , IrMnAs 等的电子结构、磁性特征, 弹塑性计算分析(提供参考文件夹和解析)
	10:25-10:40	答疑, 学员交流
	10:40-11:30	授课内容 13: VASP 软件算例全程实战 5-1:低维材料、异质结构构建与计算模拟
	11:30-14:30	自费用餐、午休
	14:30-15:20	授课内容 14: 算例全程实战 6-1:表面、界面和催化、吸附体系的构建和模拟
	15:20-15:35	茶歇, 答疑, 学员交流
	15:35-16:25	授课内容 15: 算例全程实战 6-2:反应路径(过渡态)的构建和模拟
	16:25-16:40	茶歇, 答疑, 学员交流
	16:40-17:30	授课内容 16: 算例全程实战 6-2:反应路径(过渡态)的构建和模拟(续)
	D4	8:30-9:20
9:20-9:35		茶歇, 答疑, 学员交流
9:35-10:25		授课内容 18: 算例全程实战 7-1:第一性原理声子, 有限温度下的热力学和热物性计算模拟 1
10:25-10:40		答疑, 学员交流
10:40-11:30		授课内容 19: 算例全程实战 7-2: 第一性原理声子, 有限温度下的热力学和热物性计算模拟 2
11:30-13:00		自费用餐、午休
13:00-20:00		户外素质拓展: 1. 沿海学员 上半程: “三坊七巷” 历史古街寻名人足迹(严复、林则徐、林觉民、冰心、萨镇冰, 串起半部中国近代史)等、品尝鱼丸与肉燕 户外拓展 下半程: 福州国家森林公园吸氧; 2. 内陆学员 上半程: 中国船政文化旅游区, 重点参访近代海军和铁路学堂 下半程: 长乐下沙国际海滨旅游度假区观海、踏浪、畅游; (挑选好天气) 晚餐全体学员和教员啤酒、海鲜会餐联谊。
8:30-9:20		专家高端亮点工作展播(PRL, PRB, CMS 等高产作者) 功能材料的结构与性质第一性原理计算模拟
9:20-9:35		茶歇, 答疑, 学员交流
D5		9:35-10:25

	10:25-10:40	茶歇，答疑，学员交流
	10:40-11:30	Nanodcal 量子输运计算软件和 RESCU 大体系 KS-DFT 计算软件介绍及应用(鸿之微公司高级讲师)
	11:30-14:30	自费用餐、午休
	14:30-15:20	综合复习
	15:20-15:30	茶歇，答疑，学员交流
	15:30-16:30	质效评估考核
	16:30-16:45	茶歇，答疑，学员交流
	16:45-17:30	质效评估考核讲评
D6	8:30-9:20	自主计算与研究
	9:20-9:35	茶歇，答疑，学员交流
	9:35-10:25	自主计算与研究
	10:25-10:40	茶歇，答疑，学员交流
	10:40-11:30	专家或学员亮点工作展播（3 位）
	11:30-14:30	自费用餐、午休
	14:30-15:20	自主计算与研究
	15:20-15:35	茶歇，答疑，学员交流
	15:35-16:25	授课内容 21: 研究论文解读、构思和撰写实战 3
	16:25-16:40	茶歇，答疑，学员交流
	16:40-17:30	学员亮点工作展播（3 位）
D7	8:30-9:20	授课内容 22: 研究论文解读、构思和撰写实战 4
	9:20-9:35	茶歇，答疑，学员交流
	9:35-10:25	自主计算与研究
	10:25-10:40	答疑，学员交流
	10:40-11:30	专家或学员亮点工作展播（3 位）
	11:30-14:30	自费用餐、午休
	14:30-15:20	授课内容 23: 研究论文解读、构思和撰写实战 5
	15:20-15:35	茶歇，答疑，学员交流
	15:35-16:25	学员亮点工作展播（3 位）
	16:25-16:40	茶歇，答疑，学员交流
	16:40-17:20	自主计算与研究
	17:20-17:30	闭幕

四、授课教师：

主讲人：吴波教授。福州大学教授，留德博士后，博士生导师。长期从事多尺度计算材料学的教学工作，开设了从本科生到博士生的系列计算材料学必修课程，编写了相关讲义和出版了相关教材，近 10 年来，作为项目负责人，连续获得 10 余项有关材料计算与设计方面的国家级、省部级，以及跨国企业的科研基金项目，实战经验丰富。在原子占位有序化行为研究处于独创性的国际前沿水平。

代表性论文：

[1] Bo Wu* , Yan Zhao* , Hamid Ali, Rong Chen et al. , **A reasonable approach to describe the atom distributions and configurational entropy in high entropy alloys based on site**

preference, *Intermetallics* 144 (2022) ,May, 107489. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2022.107489> (The Most Downloaded Articles in 《Intermetallics》 in the last 90 days (May--September,2022))

[2] Rong Chen, Hamid Ali, Bo Wu* , Yan Zhao, et al., **A general approach to simulate the atom distribution, lattice distortion, and mechanical properties of multi-principal alloys based on site preference: using FCC_CoNiV and CoCrNi to demonstrate and compare**, *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, 935(1):168016, <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.168016>.

[3] Bo Wu*, Zheyu Xie, Jinchang Huang, et al, Microstructures and thermodynamic properties of high-entropy alloys CoCrCuFeNi, *Intermetallics*, 2018, 93: 40-46

[4] Z. Y. Wei, Y. X. Yang, B. Wu*, et al. Prediction of site occupancy of C15 Laves phase at finite temperature based on quasi-harmonic approximation model, *Intermetallics*, 2018, 96: 33-40.

[5] Qiong Peng, Baisheng Sa*, Bo Wu*, et al. Computational mining of photocatalysts for water splitting hydrogen production: two-dimensional InSe-family monolayers, *Catalysis Science & Technology*, 2017, 7, 2744-2752.

[6] Qiong Peng, Kangming Hu, Baisheng Sa*, Jian Zhou, Bo Wu*, Xianhua Hou, Zhimei Sun*. Unexpected elastic isotropy in a black phosphorene/TiC₂ van der Waals heterostructure with flexible Li-ion battery anode applications, *Nano Research*, 2017, 10, 3136-3150.

[7] Qiong Peng, Zhenyu Wang, Baisheng Sa*, Bo Wu* and Zhimei Sun, Blue Phosphorene/MS₂ (M = Nb, Ta) Heterostructures As Promising Flexible Anodes for Lithium-Ion Batteries, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2016, 8, 13449–13457

[8] Qiong Peng, Zhenyu Wang, Baisheng Sa*, Bo Wu* & Zhimei Sun*, Electronic structures and enhanced optical properties of blue phosphorene/transition metal dichalcogenides van der Waals heterostructures, *Scientific Reports*,2016, 6:31994

[9] Zeyou Zhou, *Bo Wu, Shushi Dou, et al., Thermodynamic properties of elements and compounds in Al-Sc binary system from ab initio calculations based on density functional theory. *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2014, 45A: 1720-1735.

[10] Yufeng Wu, Bo Wu*, Zhenyi Wei, et al., Structural, half-metallic and elastic properties of the half-Heusler compounds NiMnM (M = Sb, As and Si) and IrMnAs from first-principles calculations. *Intermetallics* 53 (2014) 26-33.

[11] *Bo Wu, Hailong Liu, Chaoran Huang, et al., Prediction of the site ordering behaviours of elements in C15 NbCr₂-based intermetallics by combining thermodynamic model with ab-initio calculation. *Intermetallics*. 2013, 35: 104-109.

[12] Bo Wu*, Anglika Brückner-Foit, Qiang Li, et al., A reliability assessment method for structural metallic component with inherent flaws based on finite element analysis and probabilistic fracture mechanics model, *International Journal of Fatigue*, 2009, 31, 1882-1888.

助教：尉涛 副研究员,西安近代化学研究所, 东南大学化工学院博士生
代表性论文：

[1] Tao Yu, Maohua Lin, Bo Wu*, et al., Balanced design for the feasible super rocket fuels: A first-principle study on gauche CHN₇ and CHN₃, *Journal of Molecular Graphics and Modelling*,2018,84: 10-17.

[2] Tao Yu, Wu Bo*. A theoretical prediction on CN₆O: structure, stability and performance, *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2015.2: 91-100

[3] Tao Yu,* Hai-Bo Chang, Wei-Peng Lai and Xiao-Fang Chen, 4-Oxo- or 1-oxo-N₇O⁺,A Computational study of esterification between succinic acid and ethylene glycol in the absence of foreign catalyst and

solvent, Polym. Chem., 2011, 2, 892–896.

在线顾问助教：彭琼老师 福大硕士，北航博士，贵州大学特聘教授（多次现场助教），在影响因子 5-15 的期刊上发表 8 篇高水平论文。

助教：陈 博士，鸿之微科技(上海)股份有限公司高级技术经理，鸿之微系列软件高级技术支持。从事多尺度材料模拟计算多年微纳材料及器件微尺度模拟。

五、结业与奖励：

研习结束，对考核合格，发给研习结业证书。并对学习刻苦，表现突出（如做 10-20 分钟公开 PPT 报告）的学员进行奖励，人数占学员数 10%-30%，奖金 100 元。

六、注册费用：

春季班、初夏班、秋季班、各 4 天，2500 元/人；包含讲习资料、茶歇、欢迎午餐（1 次），超计算机时费 500 元；

暑期班、寒假班：7 天，3000 元/人，包含讲习资料，超计算机时费 500 元、茶歇、欢迎午餐（1 次）、招待晚宴（1 次）、福州半日游。其他餐饮、住宿及交通费用自理。

暑期班陪同亲属：200 元/人，包含欢迎和招待宴、福州名胜访古、海天一色、车费、景点门票、美食品鉴。

其他餐饮、住宿及交通费用自理。

七、报名时间及方式：

即日起开始报名。截止时间：每次开班前 5 天（ $1 \leq \text{人数} \leq 45$ ）。报名并缴费的前 10% 学员享受 9 折优惠，三人以上团体学员（需报名时申明确认）9.5 折优惠，现场现金返还。学员回炉报名享受 6 折优惠，并有机会享受前述折上折。

第一性原理高级用户报名参加本次学习与研讨班，愿意分享知识（辅助答疑和公开做 20 分钟-40 分钟 PPT 报告）（经过主讲教师和学员客观评估，免注册费）

报名方式：请填写附件报名表拍照发送至 info@bode-tech.cn /654489521@qq.com。

八、缴费方式：推荐提前银行转账模式，特殊需要，亦可现场现金缴费）

收款单位：福州博德新材料科技有限公司

开户行：中国工商银行股份有限公司福州金山支行

账号：1402 2677 0960 0106 909

（可开具会务通知、邀请函、参会证明、会务费发票，或培训通知、培训证明、培训费发票）

（自费学习者，不需要开具发票，可根据路程远近，学历等因素酌情优惠报名费）

九、取消政策：

报名并缴费的学员，电话或邮件提前 5 天通知组委会，经核实后，无条件全额退款，若 5 天内取消，收取 10% 的座位空置费。尚未缴费者，如遇学员爆棚，研习时间需服从调整。

十、联系方式：

Email: info@bode-tech.cn /654489521@qq.com 13023819517（吴老师）

福州博德新材料科技有限公司 福州大学多尺度材料设计与应用实验室

二〇二三年元月一日

材料-物理-化学计算模拟实用技术研修班 报名回执表

(手填后拍照提交)

线上 () / 线下 () 均可 ()

春季班 (4天) () ; 初夏班 (4天) () ; 秋季班 (4天) () ; 暑期班 (7天) () ; 寒假班 (7天) ()

您的姓名	
您的性别	
您的职称	
发票信息 (示例) (请务必每个字精确) 纳税人名称: 中国科学院上海 XX 研究所 纳税人识别号: 1210*****5006547H 地址、电话: 上海市 XX 路 1295 号 021-69****15 开户行及账号: 工行长宁愚园路支行 1001*****401960	
发票内容 (按易于报销类别开具, 提供相关盖章版支撑文档)	分析检测费 () , 加工费 () 计算服务费 () 会议费 () / 培训费 ()
通讯地址及邮编	
电子邮件	
电 话	
研究方向及课题	
计算技巧、方法中待解决问题	
硬件情况 (PC、工作站或集群规模)	
现有第一性原理软件 (除 VASP)	
VASP 版权	() 已获得; () 意向采购中
VASP 熟悉程度	() 不熟悉; () 一般; () 较熟练
是否 PPT 展播 (分享计算需求、技巧或好结果)	() 是; () 否 () 待定
是否寻求房间合住伙伴	() 是; () 否 (组委会可以提供有合住需求的报名信息)

报名表请返回至: info@bode-tech.cn, 及 654489521@qq.com