

福州博德科技--物质科学+高熵材料计算模拟--线上&线下培训服务邀请函

1. 高熵合金四大效应定量化和图像化计算模拟专题培训（论文目标导向）（详细通知备案）
2. 材料-物理-化学中的计算模拟（第一性原理计算为主）入门与提高（详细通知备案）

网页资讯：<http://www.bode-tech.cn/list-25974-20631.html>;

报名邮箱：info@bode-tech.cn ; 654489521@qq.com

咨询渠道：

高熵及固态物质计算模拟咨QQ 询群：183881047

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

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

培训模式：线上线下（超算）实战培训（可2天线上预计算+线下集中3-5天，或全部采取线上，一对多（或一对一）手把手教学巩固与作文）

培训费用：¥3000元（含¥500元超算机时费）

【Registration fee: 600\$ for DEVELOPED country register (save 100\$ if using own supercomputer resource)】

此外，对已参加过往期相关培训内容的学员，拟进一步来福州线下学习研究，场地使用费¥1500元/5天，线下免费辅导，协同攻关和作文。

备注：原则上应自备VASP，MS及热力学软件版权或申请试用版，或以适当方式合作

邀请函

尊敬的各位老师和同学，新学期好！

阳春三月，春暖花开，万物复苏，生气勃勃。不平凡的过往，皆为序章；多年的沉淀，积蓄了奋斗的力量。新时代是数字化时代，她丰富了人们的学习、工作和生活式样。

在科学研究和技术开发领域，一场数字化盛宴已经热闹开场。近年来，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。大进大出的高通量方法（high throughput method, HTM），机器学习（Machine Learning, ML）、人工智能（AI），尤其是最近赶场的生成式人工智能（ChatGPT），无一不诉说着数字化的浪潮，甚至颠覆了传统的教育和科研模式。跨越数字鸿沟，培养创新思维，掌握必要的数字工具，有望孕育出高质量的文章。

福州博德科技在多年努力的基础上，通过组织邀请行业内多位知名专家教授，基于多尺度、多结构及多物理场视野，进行若干细分领域的理论讲授、实操训练和真题作文，为相关初学者和拟提高者提供一个线上与线下、短期与长期学习研究相结合的一个可持续平台。力争让学员朋友学会先进方法，培养创新思维，产出高水平论文。

今年继续推出经过多次检验和凝练，具有很好研修基础的部分线上、线下（或混合式）培训课程，满足迫切需要，为材料-物理-化学研究中的计算模拟（通用领域）及高熵合金（高熵陶瓷）材料四大效应定量化和图像化表征（细分领域）的普及和提高贡献一份力量。

欢迎关注年度研修资讯(详见附件)，尤其欢迎提出个性化需求，利用好零星小时间，线上线下相结合，把看似烧脑的枯燥晦涩理论和复杂陌生专业软件早接触、早学习，早应用，早出成果，从入门到精通。

福州研修会所(博德科技)欢迎您！

研修服务简介目录

1. 培训课程 1-基于原子择优占位的高熵合金（高熵材料）
四大效应的定量化计算和图像化表征研修班简介..... P2
2. 培训课程 1-材料-物理-化学计算模拟实用技术研修班简介.... P12
3. 首席教学和科研负责人简介... P18
4. 线上线下教学研究条件简介... P21

研修课程 1 简介

基于原子择优占位的高熵合金（高熵材料）四大效应的定量化计算和图像化表征 系列方法线上&线下实战研修班通知

Series of Practical Training Seminars for

Quantitative calculation and graphical characterization of four Core effects of high entropy alloy (high entropy materials) based on atomic site preference

(General Flyer)

时间 Date: (按需开展线上/线下教学,早学早用, 人数不限)

春季班: 3月 27-31日; 寒假班 1月 8-14日

初夏班: 4.28-5.2; 暑期班: 7月 17-23日; 秋季班: 11月 1-5日)

(一次注册, 长期线上保驾护航, 直至论文发表),

方式 Way: 线上线下同步讲课, 云计算展播、训练和 QQ 远程协助相结合(Combination of online course, cloud computing demonstration, training and remote personal assistance)

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

承办: 福州博德新材料科技有限公司 www.bode-tech.cn

协办: 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](#))

Host: Multi-scale Computational Material Facility, School of Materials, Fuzhou University

Co-organized: Fuzhou Bode Advanced Material Co., Ltd. Beijing Parallel Technology Co., Ltd.

注册费: ¥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)。

Registration fee: 600\$ for DEVELOPED country register (save 100\$ if using own supercomputer resource)

高熵合金（高熵材料）及固态物质计算模拟专题培训咨询 QQ 群: 183881047

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

Teacher's skype ID: drwubo@hotmail.com

1. 达成目标

基于晶体结构模型构筑合金热力学模型, 结合相平衡和第一性原理计算, 完成各种结构的高熵合金（高熵材料）（单相为主）四大效应的定量化和图像化表征。

计算零基础学员, 完成一个自己选定的高熵合金（高熵材料）体系, 对其结构和性质进行全流程定量化和图像化表达, 包含自主建模、热力学数据库构建、占位分数计算、基于占位分数的原子分布模型构建、短程有序或局域有序化团簇, 点阵常数、晶格畸变驱动力及畸变率, 弹性各向异性力学性质、韧性、间隙原子扩散、初步了解高熵合金（高熵材料）的催化特性建模和计算分析之

定量化和图像化表达。没出论文初稿，不准走人（包教包会，长期在线辅导,疫情平稳后，欢迎到福州江景 SOHO 现场作文，或吴波教授受邀到贵单位走访辅导）

1. Achieve your goals

Based on crystal structure model, building alloy thermodynamics, by combining computational thermodynamics and first-principles calculations, the four core effects of high entropy alloys with various structures (single phase) were quantitatively and graphically characterized.

Students practice a self-selected high entropy alloy, achieve independent modeling, thermodynamic database construction, site occupying fractions calculation, atomic distribution model construction based on site occupying fractions, short range ordering(SRO) or local ordering, diverse mechanical property calculation, interstitial atom diffusion, and preliminary understanding of catalytic characteristic modeling and calculation analysis of high entropy alloy. (Online consult and help are available till well grasping)

预报名表接收邮箱: info@bode-tech.cn, wubo@fzu.edu.cn

Register Form please Email to info@bode-tech.cn, wubo@fzu.edu.cn

授课咨询 Consult for teaching course: 吴波 教授(Prof. Wu) 13023819517(微信) wubo@fzu.edu.cn

课堂入口信息: 开课发送内部授课资料和腾讯会议登录信息到报名邮箱

Classroom entrance information: The teaching materials and Tencent conference login information will be emailed to the registration mailbox before the class starts

备注: 原则上应自备 VASP\PHONOPY\热力学软件版权或申请试用版, 或以适当方式合作

Remarks: In principle, you should bring your own VASP\ PHONOPY\ thermodynamic software copyright or apply for a trial version, or cooperation properly

2.需求分析

高熵合金（高熵材料）是一种划时代的材料设计理念，不少材料具有一种或多种潜在的优异性能，由此也启发人们提出了**各种各样高熵材料新概念，频频艳羡于《Nature》 & 《Science》，此乃高熵合金幸事和盛世**。与此同时，高熵合金（高熵材料）存在很多争议，甚至连高熵合金这个名字都被不少有识之士避而不谈。广为人知的高熵合金（高熵材料）的四大效应（热力学上的高熵效应，动力学上的迟滞扩散效应，结构上的晶格畸变效应，性能上的鸡尾酒效应），也不时受到质疑，因为随便一种效应，都很容易被人举出反例而显得尴尬，说明高熵合金（高熵材料）的合金化理论研究（结构与性能的关系）还很不充分。另一方面，合金成分组合海量，如何钓到大鱼，烧钱式广泛撒网并不可取，也不可能。与其临渊羡鱼，不如退而结网，把基础方法搞通再出海。基于材料基因工程理念，运用高通量实验，尤其是借助高通量计算，积累海量数据后辅助以机器学习的 AI 材料设计是必由之路。

考虑到组成高熵合金（高熵材料）的原子种类众多，各种组成原子结构和性质各异，FCC, BCC 和 HCP 也呈现出迥异的晶体结构，因此，原子在亚晶格和整体晶格上必然存在择优占位行为（占位有序化行为，site preference），而基于传统的随机固溶体模型方法的 SQS 及 CPA-EMTO 似乎不能描述真实合金体系的结构特性，既抹杀了组成原子种类差异，也抹杀了合金相结构差异，并且还忽略了热处理温度的影响，用 $S=R\ln(n)$ 描述构型熵，这只代表了实际并不存在的那种最理想的原子排布模式。因此，将复杂的高熵合金（高熵材料）简单化描述，感觉不一定站得住脚。高熵合金（高熵材料）研究开发已发展到新阶段，有必要也有可能进行理性化描述。

基于以上理性思考和实践，吴波等人经过多年前期探索，创新性地建立了一系列定量化和图像化描述高熵合金（高熵材料）的四大效应的理性方法，系列方法论学术论文和专利发表后，引起同行较大关注，收到不少热情鼓励和诚恳建议，也收到不少的学习咨询，期望提供学习和计算模拟实战机会。新冠疫情复杂多变期间，高熵材料发展不停步，学术论文仍一日见刊 10 篇以上，不乏 N&S 大刊。研究者对该领域的新方法和新想法必须密切跟进，才能有高质量的科研成果。因此，本系列培训应需而为，以期为同行提供一些理性思路和新方法。

2. Requirements analysis

High entropy alloy is an epoch-making alloy design concept. Many alloys may have one or more potential excellent properties, which also inspires people to put forward various new concepts of high entropy materials. **High impact papers are emerging every day, even highlighted in 《Nature》 and 《Science》, thus it is a Booming Times of HEAs.** However, there are many controversies about high entropy alloy, and even the name of high entropy alloy has been avoided by many people of insight. The four well-known effects of high entropy alloy (high entropy effect in thermodynamics, sluggish diffusion effect in kinetics, severe lattice distortion effect in structure and cocktail effect in performance), It is also questioned from time to time, because any kind of effect is easy to be cited as a counterexample, which shows that the alloying theory research (the relationship between structure and properties) of high entropy alloys is still insufficient. On the other hand, there are a large number of alloy compositions, so it is neither advisable nor possible to catch big fish and burn money to cast a net widely. It is wisdom to find a reasonable reliable and general simulation approach at first. Artificial Intelligent Materials Design (AI-MD) is the future way based on the concept of material genetic engineering, by employing high-throughput experiments, especially high-throughput calculations, assisting machine learning after accumulating massive data.

Considering that there are many kinds of atoms that make up high entropy alloys, different kinds of constituent atoms have different structures and properties, FCC, BCC and HCP also show different crystal structures, Therefore, atoms must have preferred site preference on sublattice and global lattice. However, **SQS and CPA-EMTO based on the traditional random solid solution model method can't describe the structural characteristics of real alloy system. They not only ignore the differences of composition atoms, but also ignore the differences of alloy phase structure, and even ignore the effect of heat treatment temperature on the site preference, thus $S=R\ln(n)$ is used to describe the configuration entropy, which only represents the most ideal atomic arrangement mode that does not exist in practice.** Therefore, it may not be tenable to simplify the description of complex high entropy alloys. The research and development of high entropy alloys has developed to a new stage, so it is necessary and possible to describe them rationally.

Based on the above rational thinking and practice, Prof. Dr. Wu Bo and others colleagues put forward a series of methods to describe the four effects of high entropy alloy quantitatively and graphically after many years of early exploration. After the publication of a series of methodological academic papers and patents, they attracted great attention from peers and received many peer comments and consultations, expecting to provide sharing and teaching opportunities. There are still 10 complex and high-entropy academic papers in COVID-19 pandemic every day, including published in 《Nature》 and 《Science》. Thus, new methods and ideas in this field must be closely followed up in order to have high-quality scientific research results. Therefore, this series of training should be needed to provide some new ideas and methods for peers.

3.课程之学术思想及讲授提纲（讲课和上机实践安排表细化后公布）

- 高熵合金（高熵材料）理论研究进展述评 高熵合金（高熵材料）计算模拟方法述评
- 第一性原理计算方法快速入门 计算热力学与相平衡快速入门
- 高熵合金（高熵材料）有序化结构建模，高熵合金（高熵材料）合金热力学描述
- 端基热力学数据库构筑，相比例、相成分、占位分数计算
- 基于占位分数的原子分布模型搭建
- 平衡态下局域有序结构定量化和图像化表征
- 晶格畸变驱动力及晶格畸变率定量化和图像化表征
- 高熵合金（高熵材料）电子结构分析

- 高熵合金（高熵材料）基态及高温力学性能预测
- 间隙原子扩散能垒波、扩散常数、扩散系数计算
- 高熵合金（高熵材料）表面能，表面吸附
- 高熵合金（高熵材料）催化建模、计算与分析初步

以学校分房打比方，说明择优占位的竞争性，
 FCC 顶点亚晶格1a--豪华别墅，面心亚晶格3c--单层别墅
 100套房子中，豪华别墅25套，单层别墅75套，
 参与分房的教师队伍
 国家级人才(M1-atom)20名，教授(M2-atom) 20名 副教授(M3-atom) 20名，讲师(M4-atom)20名，助教(M5-atom) 20名

分房时，绝对不可能不加区别，两种房型放在一起，所有老师都放一起抓阄，
 必须对两类房子进行估值，对每位老师进行打分排队，促进内卷，而不是鼓励躺平，
 自然与社会，万事万物莫不如是。

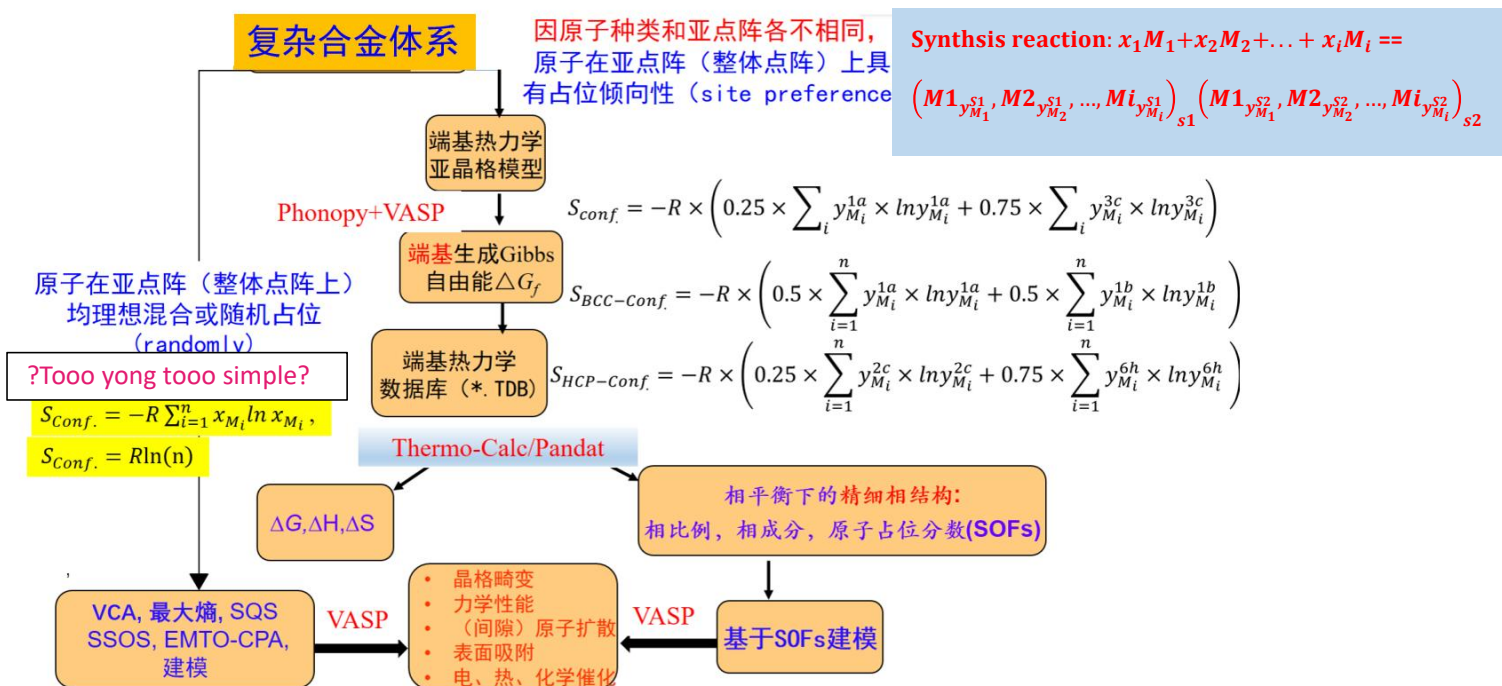


Fig. 3-1. Academic innovative and research flow chart of complex alloy phase with site occupying fractions.

3. Schedule of course teaching, modeling and computer calculation

- (1) Review on the theoretical research progress of high entropy alloys
- (2) A quick start to First-principles computing methods

- (3) A Quick start to computational thermodynamics and phase equilibrium
- (4) Description of calculation and simulation methods for high entropy alloys
- (5) Ordered structure modeling of high entropy alloys (high entropy materials)
- (6) Thermodynamic description of high entropy alloy (high entropy materials)
- (7) Construction of end-based thermodynamic database of high entropy alloys (high entropy materials)
- (8) Calculation of phase proportion, phase composition and occupying fraction
- (9) Establishment of atomic distribution model based on occupying fraction
- (10) Quantification and image characterization of Local ordered structures in equilibrium state
- (11) Electronic structure analysis of high entropy alloy (high entropy materials)
- (12) Prediction of mechanical properties of high entropy alloys (high entropy materials)
- (13) Calculation of diffusion energy barrier wave, diffusion constant and diffusion coefficient of interstitial atoms
- (14) Surface energy, surface adsorption of high entropy alloy (high entropy materials)
- (15) Preliminary modeling, calculation and analysis of high entropy alloy catalysis

3. 其他参考资料

3.1. 学术积累

(1) 科研项目

- Proj.1. 高熵合金形成的热力学原理和成分设计新方法探索 (国自然面上项目)
- Proj.2. 金属间化合物中合金元素的占位有序化行为研究 (国自然面上项目)
- Proj.3. 高铁、高铝低成本高熵合金的热力学、成分和性能优化设计研究 (教育部博导基金)
- Proj.4. 耐蚀、高弹、磁性高熵合金的设计、制备与性能研究 (省自然面上项目)
- Proj.6. FCC 高熵合金设计新原理和新方法研究 (省人才项目)
- Proj.7. 含 Fe、Co、Ni 五组元 FCC 结构高熵磁性合金成分数据库的设计研究及制备
- Proj.8. 耐腐和高弹性的多主元高熵合金设计方法和数据库研究

(2) 专利 Patents

- [1] ZL2021100207115 基于原子占位有序化行为的高熵合金构型熵的计算方法, 发明专利, 免答辩授权
- [2] ZL2020112307425 基于原子占位有序化行为的高熵合金晶格畸变量计算方法, 发明专利, 免答辩授权
- [3] ZL2021100169842 一种间隙原子在高熵合金中的扩散行为的计算方法, 发明专利, 小修后已授权
- [4] 2020112947690 基于原子在亚晶格占位行为的高熵合金力学性能计算方法, 实质审查生效
- [5] 2022111038083 一种基于 Python 的原子配位数自动化批量计算统计方法, 实质审查生效
- [1] ZL2021100207115, Calculation method of configuration entropy of high entropy alloy based on atomic occupation ordering behavior, Granted invention patent
- [2] ZL2020112307425, Calculation method of lattice distortion of high entropy alloy based on atomic occupation ordering behavior, Granted invention patent
- [3] ZL2021100169842, A method for calculating the diffusion behavior of interstitial atoms in high entropy alloys, Granted invention patent
- [4] 2020112947690, Calculation method of the mechanical properties of high entropy alloy based on the occupation behavior of atoms in sublattice, substantive examination takes effect, 1st-turn defence response
- [5] 2022111038083, An automatic batch calculation statistical method of atomic coordination number based on Python, substantive examination takes effect

(3) 论文 Academic papers

[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))

【论文中文解读:

https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzIzMtUzMDk4Mw==&mid=2247484134&idx=1&sn=b0136482fab4a2bd71b0766243aafcba&chksm=e8a38aedfd40378ac65c2e43ab3da29e11747444d2d5867124c6c9220dc135c058a416fbd9e&cur_album_id=2697658112350339074&scene=189#wechat_redirect】

[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>.

【论文中文解读: https://mp.weixin.qq.com/s/vttSf75_UF0eTnTZIMUFxg 】

[3] H. Ali, R. Chen, B. Wu*, T. Xie, L. Weng, J. Wen, Q. Yao, L. Su, Y. Zhao, P. Zhao, B. Sa, Y. Liu, C. Wang, H. Su, A. Hayat, **The site preference and doping effect on mechanical properties of Ni₃Al based γ' phase in superalloys by combing first-principles calculations and thermodynamic model**, *Arabian Journal of Chemistry*. 15(11) (2022) 104278, <https://doi.org/10.1016/j.arabj.2022.104278>

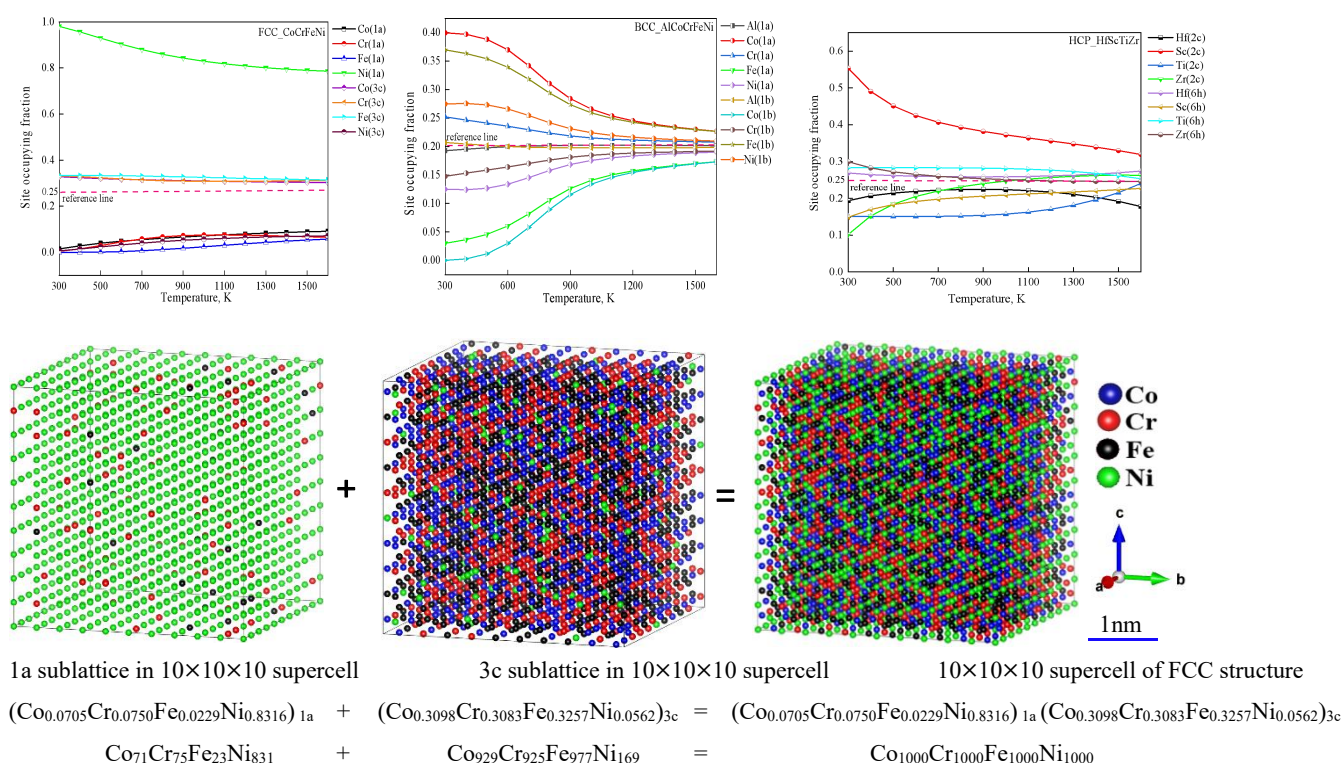
[4] H. Ali, R. Chen, H. Chen, Y. Zhao, P. Zhao, S. Yang, B. Wu*, J. Wen, C. Zhang, L. Weng, T. Xie, Q. Cai, L. Zhang, Z. He, Q. Yao, H. Zhang, B. Sa, C. Wen, C. Wang, **The Ordering Behavior of Co₃Al-based γ' Phase with L1₂ Structure Predicted by the Thermodynamic Model with Support of First-principles Calculations**, *Materials Today Communications*. 33 (2022) 104447, <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.104447>

[5] Bo Wu* , Zheyu Xie, Jinchang Huang, Jinwei Lin, Yixu Yang, Linqiao Jiang, Jianglin Huang, Guoxin Ye, Chunfeng Zhao, Shangjin Yang, Baisheng Sa, **Microstructures and thermodynamic properties of high-entropy alloys CoCrCuFeNi**, *Intermetallics* 93 (2018) 40–46. , <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2017.10.018>

[6] 谢哲宇, 吴波*, 黄锦长, 杨义许, 李皎亮, **多元高熵合金 MoNbTaVW 中合金元素的占位行为**, 中国科技论文在线精品论文 (博士点基金博导类结题指定在线发表论文)

[7] Zhang C, Lin M, Wu B et al. **Explore the Possibility of Forming fcc High Entropy Alloys in Equal-Atomic Systems CoFeMnNiM and CoFeMnNiSmM**. *Journal of Shanghai Jiaotong University (Science)*, 2011, 16(2):173-179.

3.2. 图文案例



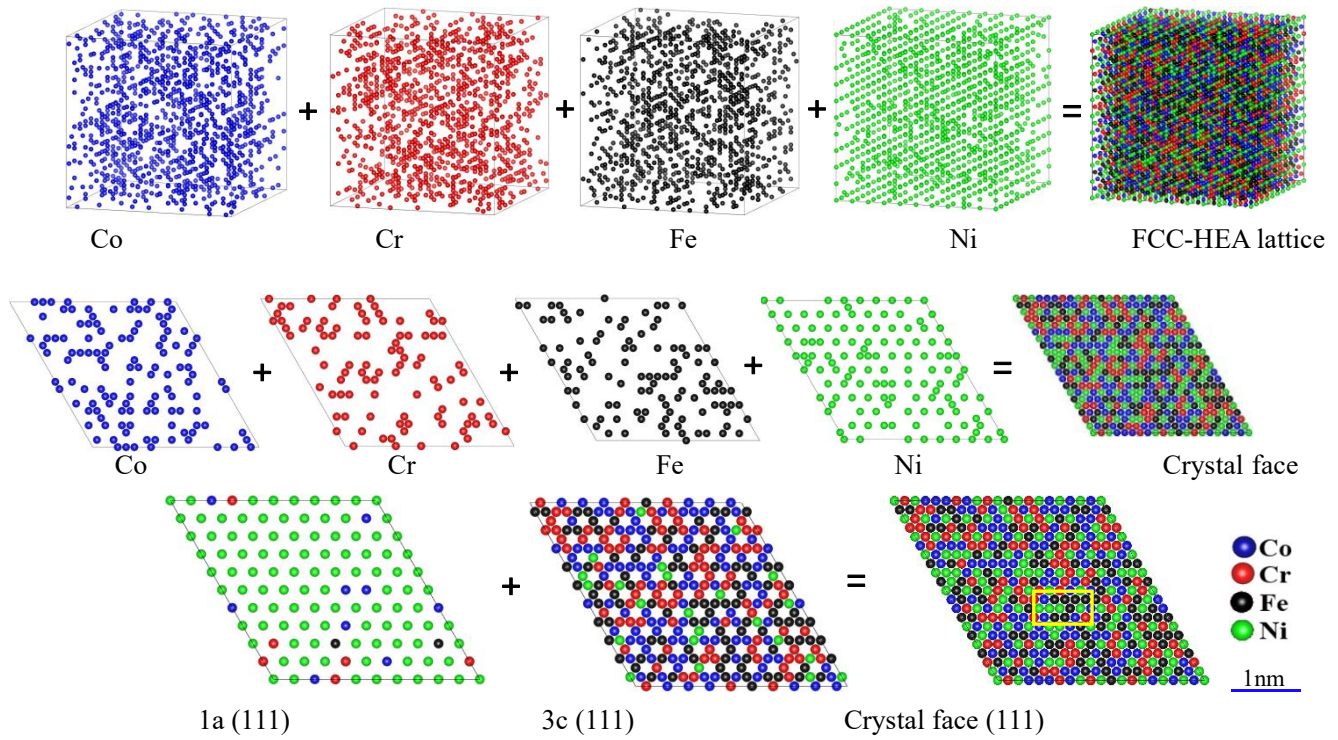


Fig. Visualization of atomic distribution with the real relative size on the sublattice 1a and 3c, as well as on the full FCC lattice for FCC_CoCrFeNi HEA subjected to heat treatment to equilibrium at 973K

The site preference of atoms is considerably strong. For the CoCrFeNi high entropy alloy with FCC phase structure, Ni strongly favors 1a sublattice, and the Co, Cr, and Fe prefer to 3c sublattice when the phase reaches its equilibrium at 973K. The local ordered cluster is identified directly.

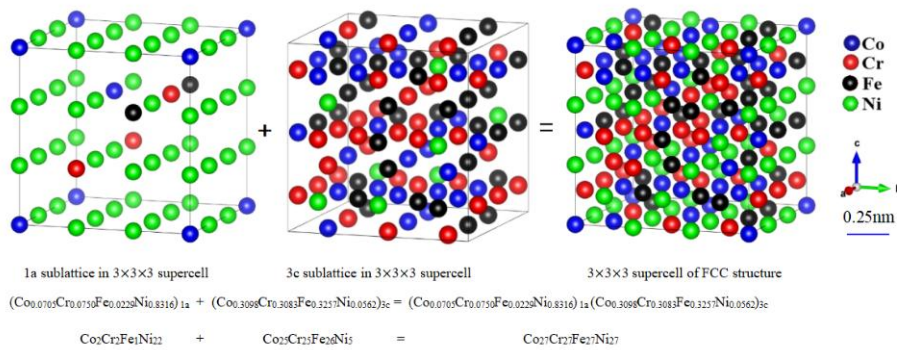
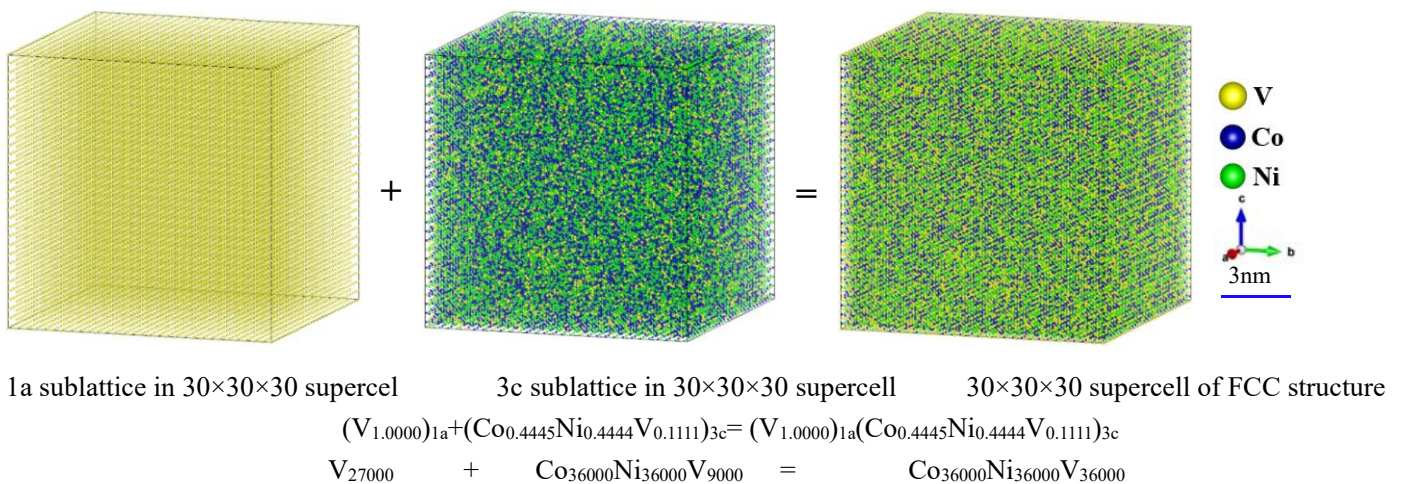


Fig. 7 Construction of a 3x3x3 FCC supercell for FCC_CoCrFeNi HEA with sublattice nested at 973K



(c) Construction of a 30x30x30 FCC supercell based on the prototype of L1₂-AuCu₃ for FCC_CoNiV MEA at all temperature

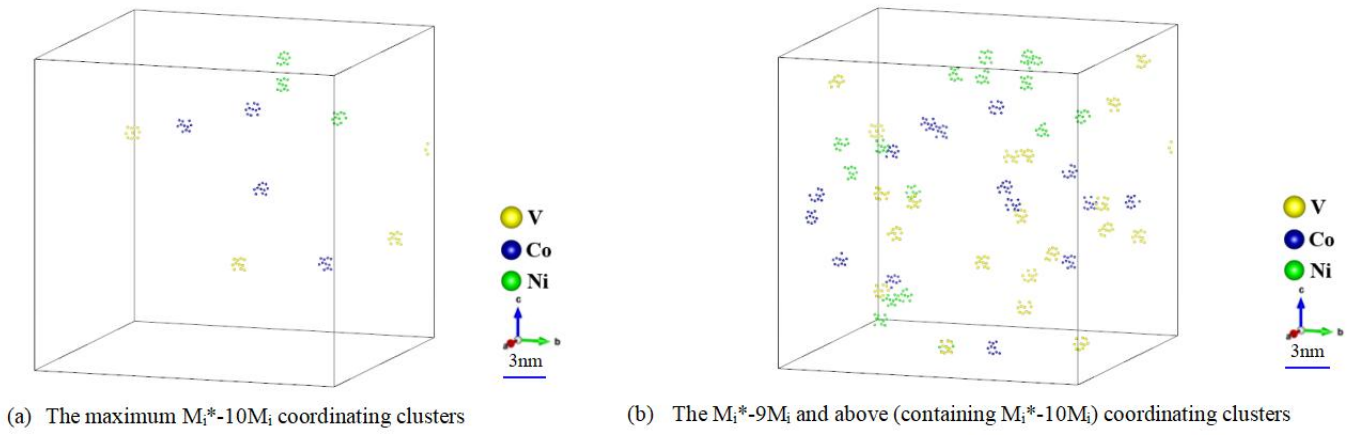


Fig. 11. The maximum $M_1^*-10M_1$ coordinating clusters in a hypothesized randomly mixing configuration of FCC_CoNiV MPA with a $30 \times 30 \times 30$ FCC supercell based on the prototype of $L1_2_AuCu_3$ containing 108,000 atoms

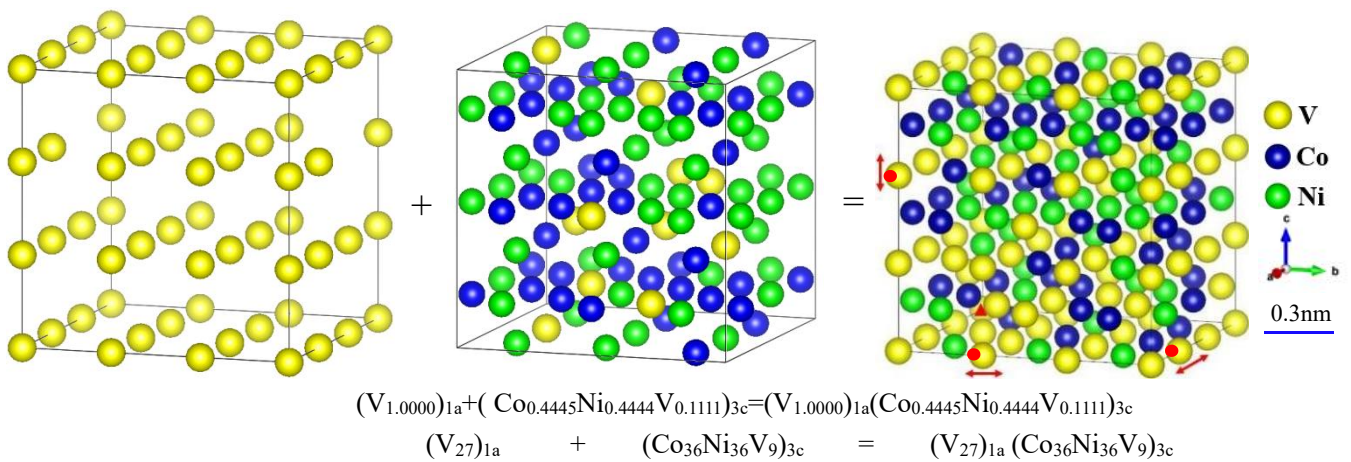
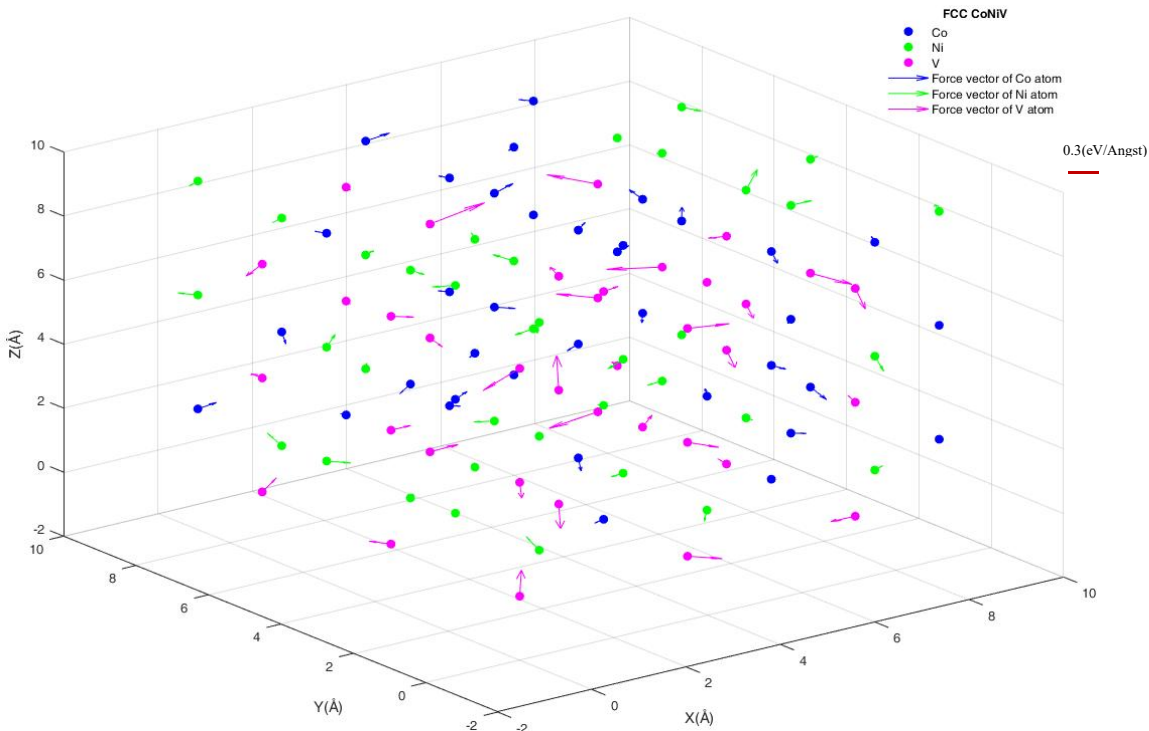
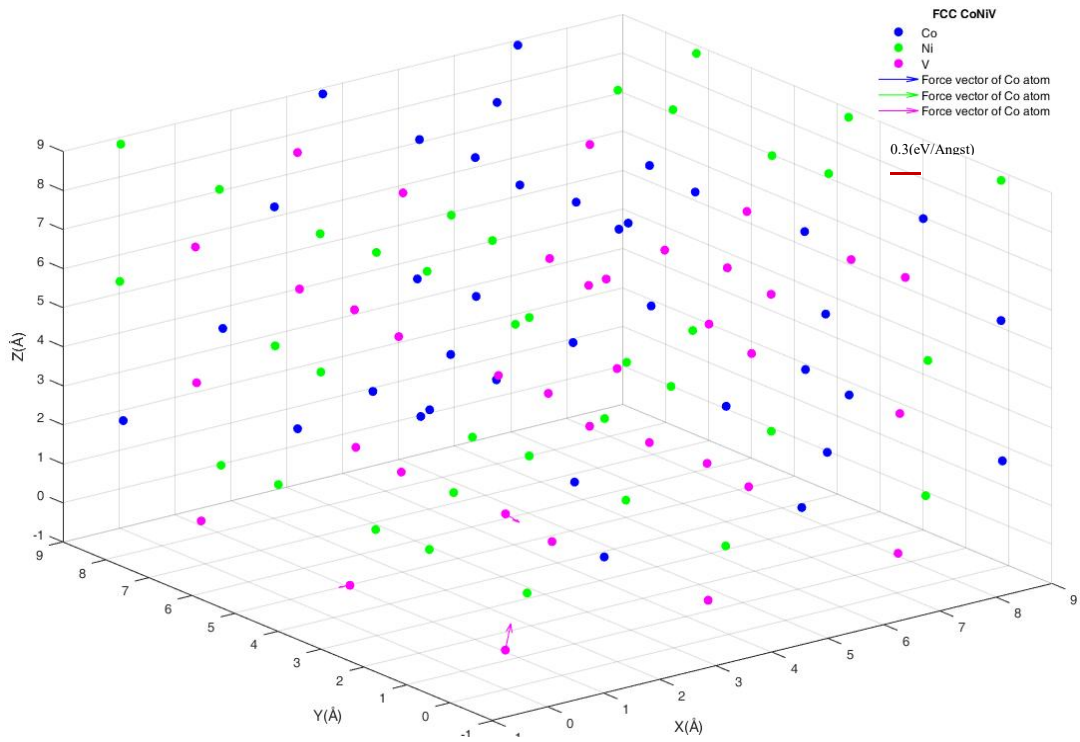


Fig. 12 $A3 \times 3 \times 3$ FCC supercell based on the prototype of $L1_2_AuCu_3$ containing 108 atoms for FCC_CoNiV MPEA used to fulfill first-principles calculation based on the available computer power.

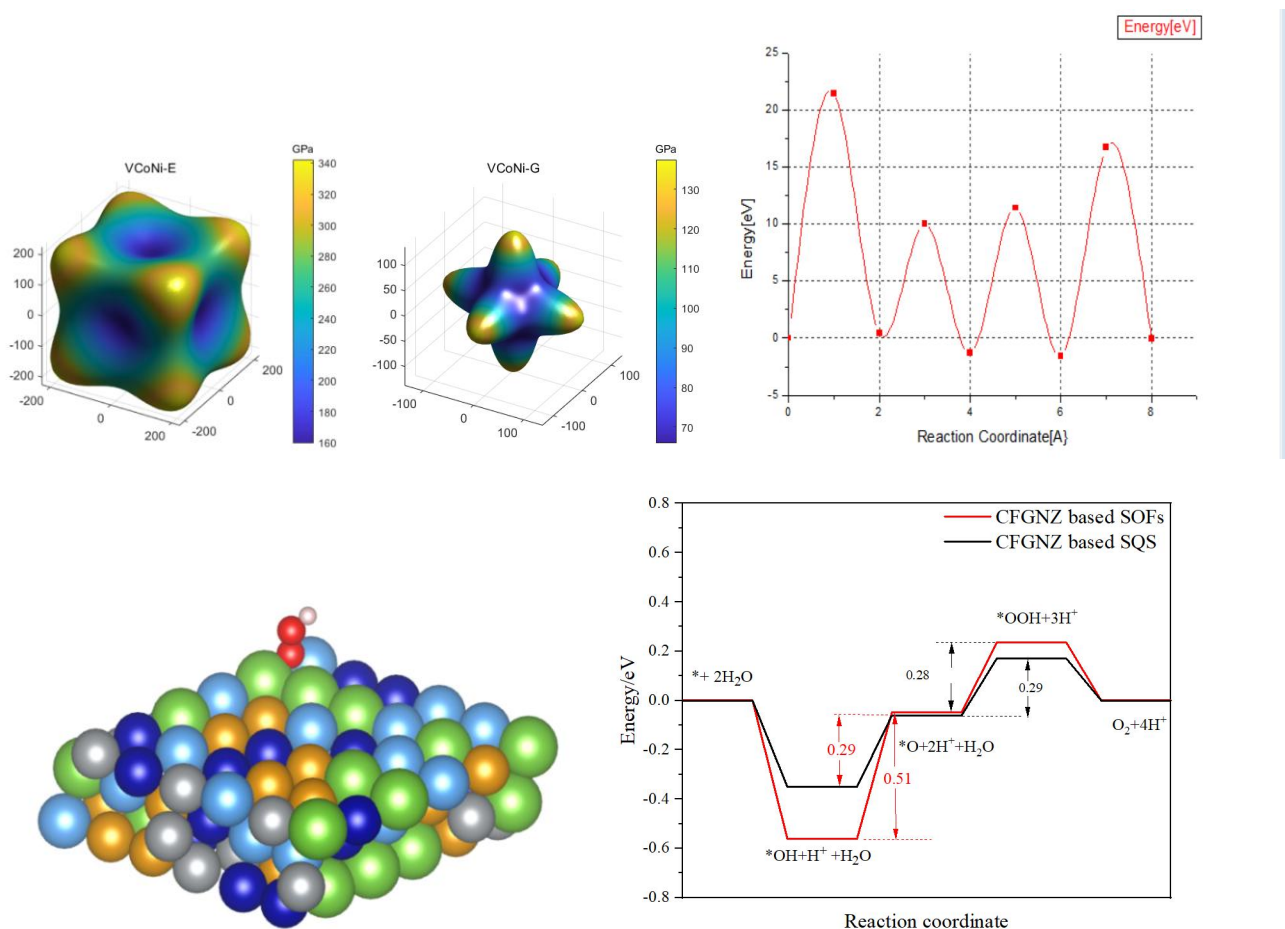


(a) Driven force of lattice distortion analyzed from the resultant force acting on each atom of the FCC_CoNiV MPEA without lattice distorting after volume relaxing only (R7)



(b) Driven force of lattice distortion analyzed from the resultant force acting on each atom of the FCC_CoNiV MPEA with lattice distorting by full relaxing (R3, volume, shape and atom positions were allowed to relax)

Fig. 16. Driven force of lattice distortion analyzed from the resultant force acting on each atom of the FCC_CoNiV MPEA with and without lattice distortion based on the SOFs at 973 K



Other advanced calculation and characterization such as

- Electronic Structure with DOS, pDOS, Chemical bond, Electronic local function (ELF), charge map,
- Anisotropy mechanical properties characterized quantitatively and intuitively,
- Check and verify the exact cocktail effect,
- Barrier wave and coefficients of interstitial atom diffuse,
- Surface properties
- Absorption of some definite surface
- Catalytic properties
- Miscellaneous ...

+specially welcome the Puzzles to explore from students in due course.

+Many interesting results to share!

学员任务进程表 (阶段性自我对照表) 汇报日期 2023-01-28												
学习内容	1. 引言: 计算模拟背景理解	2. 第一性原理全流程 -r31-r3f -dos-ban d-optics -E-V	3. 端基声子热力学计算	4. 端基声子热力学 G(T) 多项式拟合	5. 数据库构建 (至少会在模板上替换一个端基)	6. 占位分数 SOFs 计算, 构型熵定量化计算	7. 基于占位分数 SOFs 高熵合金 POSCAR 结构模型, 团簇, 短程序	8. 高熵合金 POSCAR-r7-r7+r3 晶体结构优化计算及晶格畸变分析	9. 对于平衡体积左右偏离, 不同体积下总能计算, 拟合状态方法获得体积弹性模量 B	10. Cij (弹性系数矩阵计算-参考 2009 吴松文档)	11. 基于块体 POSCAR, 用 VESTA 转换出 *.cif, 用 Materials Studio 切出表面, 吸附, 催化初探	12. 学术论文构思和撰写 (题目, 框架, 前言选题, 素材积累, 句段积累及成文情况)
吕明月-福师大	√	√	√	√	√	√	√	√	√	√	doing	doing
高妞-华中科大	√	√	√	√	√	√	√	√	√	to do	doing	doing

Bring you a chance, are you ready ?

Just join the Simulation Seminar of High Entropy Materials.



Universität Stuttgart



Deutsche Forschungsgemeinschaft
German Research Foundation

Ph.D. position in computational materials science at University of Stuttgart, Germany

Contact PI: Dr. Xi Zhang

Project description

A three-year DFG-funded project on "Diffusion in BCC high-entropy alloys from experiment and *ab initio*". This project is in collaboration with the team of Apl.-Prof. Dr. Sergiy Divinski at University of Münster (Germany, experimental part). The Stuttgart team (head: Prof. Blazej Grabowski) will mainly work on *ab initio* DFT-informed simulations. The main objective of the project is to develop a general and versatile approach for accurately describing substitutional diffusion in multi-component alloys with an unprecedented accuracy.

Simulation methods

DFT calculations, molecular dynamics, thermodynamic integration, machine-learning interatomic potentials, coarse-grained approaches e.g., cluster expansion method, kinetic Monte Carlo simulations.

Request

1. Master of physics or materials science with a computational background.
2. Knowledge: solid state physics, alloy thermodynamics and kinetics, quantum mechanics, density functional theory
3. Coding skill e.g., Fortran, Python, shell script, etc.
4. Good English (both oral and scientific writing)
5. Good team work

We offer

- ✓ A three-year PhD position (salary: TV-L 13 50%)
- ✓ Annual project workshop (Stuttgart-Münster)
- ✓ German and international conferences

Starting time

Before June 2023

Contact

xi.zhang@imw.uni-stuttgart.de

培训课程 2 简介

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

时间 Date: (按需开展线上/线下教学,早学早用, 人数不限)

春季班: 3月 27-31 日; 寒假班 1月 8-14 日

初夏班: 4.28-5.2; 暑期班: 7月 17-23 日; 秋季班: 11月 1-5 日)

(一次注册, 长期线上保驾护航, 直至论文发表),

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: 龙讯矿腾、鸿之微科技

高熵及固态物质计算模拟咨 QQ 询群: 183881047

注册费: ¥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)。

Registration fee: 600\$ for DEVELOPED country register (save 100\$ if using own supercomputer resource)

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, 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 (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, 自 2014 年以来, 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。多年来, 海内外参训学员超过 600 人次。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。不少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, 职业前景光明。

在不断夯实和凝练的基础上, 2023 年在福州继续开设“材料-物理-化学计算模拟实用技术”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, 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。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, 并构思和撰写新材料结构与性能的计算模拟学术论文。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：

时间见通知首页，按需开展线上/线下教学，早学早用，人数不限。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-A1-903（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，可通宵达旦计算。上机练习和辅导答疑时间充足。

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	开幕 授课 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 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 3：物质结构基础和第一性原理（或从头算）理论简介
	11:30-14:30	欢迎午宴、午休
	14:30-15:20	授课 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, CH ₃ CH ₂ NH ₂ SnI ₃ 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 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, CH ₃ CH ₂ NH ₂ SnI ₃ 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 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 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 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 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 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 11: VASP 软件算之全程实战 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 ₂ AlNb、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 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 13: VASP 软件算例全程实战 5-1: 低维材料、异质构建与计算模拟	
	11:30-14:30	自费用餐、午休	
	14:30-15:20	授课 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 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 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	授课 17: 研究论文解读和撰写实战 1: Ab initio materials design for transparent-conducting-oxide-based new-functional materials
		9:20-9:35	茶歇, 答疑, 学员交流
9:35-10:25		授课 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 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: 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 下半程: 福州国家森林公园吸氧; 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; 晚餐全体学员和教员啤酒、海鲜会餐联谊。	
D5		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
		9:35-10:25	授课 20: 研究论文解读、构思和撰写实战 2: 指导构思和搭建新材料结构与性能的第一性原理计算模拟方面的学术小论文 (结合主讲教师研究经历和学术交流信息, 以及结合学员研究课题实际, 提供 10 余个论文标题, 核心模仿文献和模板)
		10:25-10:40	茶歇, 答疑, 学员交流
		10:40-11:30	ADD3, 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 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	ADD4: PWmat 国产计算模拟软件平台推介
D7	8:30-9:20	授课 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 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 **10** 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：

¥**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。【Registration fee: 600\$ for DEVELOPED country register (save 100\$ if using own supercomputer resource)】

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。

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，如学员较多占用其他学员学位，则收取 10% 空置费。尚未缴费者，如遇学员爆棚，研修时间需服从调整。

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

3. 首席教学和科研负责人简介



吴波，留德博士后，福州大学教授，博士生导师。

吴波教授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涵盖多尺度、多结构及多物理场的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。近 3 年连续参加中国钢研主办的“国际材料难题悬赏征算”双创活动，多个项目获得优异成绩，包括一等奖 1 项（奖金 8 万元），三等奖 2 项，优秀奖 2 项，创新能力显著。培养包含 2 名外国博士留学生在内的博士硕士研究生 80 余名，本科生（毕业论文）150 余名，大部分毕业生已经事业初成，职业前景光明。

计算机在材料科学与工程中的应用

主 编 张朝晖
副主编 吴 波
主 审 程兴旺

教指委规划教材
2008年第1版，2022年第2版
第5章 材料计算与模拟 吴波

中南大学出版社

第 5 章 材料科学与工程中的多尺度、多物理场计算与模拟	143
5.1 材料科学与工程研究的发展阶段	143
5.2 材料科学与工程的数字化研发新概念	143
5.3 基于人工智能技术的材料科学研究方法	145
5.4 人工智能材料设计	146
5.5 材料设计概述	149
5.5.1 材料设计的定义、范围与层次	149
5.5.2 多尺度材料设计	149
5.5.3 计算模拟可靠性的判断方法	153
5.6 材料设计基础	153
5.6.1 电子结构计算	154
5.6.2 材料热力学、动力学和相图计算	160
5.6.3 基于概率断裂力学的可靠性评价	164
5.7 材料设计软件及应用	168
5.7.1 量子化学第一性原理计算软件	168
5.7.2 材料热力学和相图计算软件	185
5.7.3 基于有限元分析和概率断裂力学的可靠性评价软件	196
5.8 计算机辅助材料设计与模拟举例	198
5.8.1 无机功能材料设计——过渡金属元素掺杂 TiO ₂ 光催化剂的电子结构第一性原理研究	198
5.8.2 金属材料设计——Ti ₂ AlNb 基合金的相结构设计	203
5.8.3 多场耦合应用实例——液态金属连续铸造工艺的多物理场模拟	205
习题及思考题	209
参考文献	213

2021年度中国钢研悬赏征算项目获奖名单

一等奖 (8万)

谢锦丽 (21-01: 机器学习)	秦湘阁 (21-03: 脉冲渗碳)	吴波 (21-09: 高温高压相图)
----------------------	----------------------	-----------------------

二等奖 (3万)

刘哲 (21-01: 机器学习)	吴兴培 (21-02: 自耗电极)	任伟 (21-04: 永磁材料)	李春龙 (21-05: 腐蚀)
王传军 (21-06: 蠕变机理)	李吉 (21-07: 增材制造)	王天琪 (21-08: 冷裂纹)	平韶波 (21-10: 等离子喷涂)

三等奖 (1万)

连正亨 (21-01: 机器学习)	元欣波 (21-01: 机器学习)	王传军 (21-01: 机器学习)	肖磊 (21-02: 自耗电极)	何培刚 (21-03: 脉冲渗碳)	吴波 (21-04: 永磁材料)
马源 (21-05: 腐蚀)	阮璐风 (21-05: 腐蚀)	谢琰军 (21-07: 增材制造)	罗蕙佳代 (21-09: 高温高压相图)	倪子月 (21-10: 等离子喷涂)	

吴老师-高熵合金&高熵陶瓷 CMS 研修班 QQ 群

“中国钢研2023年度悬赏征算项目”启动任务征集

“悬赏征算”项目是在中国钢研科技发展部、战略发展部策划下，集团数字...



微信

风平浪静 2023-02-07 08:34:38

今年又启动了，大家可关注和参与

风平浪静 2023-02-07 08:35:58

@全体成员 杨丽同学就是这项赛事大内总管，可以近

水楼台先得月 🤔

杨丽-中国钢研 2023-02-07 08:39:14

😂😂，吴老师每年都有参与到我们悬赏征算活动，每年都能带来不一样的精彩和成果展现。大家现在学习的很多都是吴老师的独门技术，一定要多跟吴老师请教学习 🤔👍

风平浪静 2023-02-07 08:40:24



项目名称	吴波组战绩
晶格占位无序度与合金磁性能影响规律研究	优秀奖
退火过程中非晶/纳米晶转变行为模拟	
太空电梯绳索材料设计	优秀奖
矩形磁铁无支撑悬浮方案	
不同 H ₂ /CO 还原气体比对竖炉直接还原过程影响的数值模拟	
金属粉末高温高压近净成形的致密化计算	
选区激光熔化构件内部残余应力和变形的数值模拟	
太阳光选择性透过/反射薄膜设计	
不锈钢超低温 FCC-BCC 相变分析	
金属多孔材料腐蚀性能预测模型	
针对模拟试验数据的机器学习优化方法	
直流自耗电极金属液滴形成过程模拟	
低压脉冲渗碳组织及变形预测	三等奖
稀土永磁合金的流程化建模计算及性能筛选 APP 构建	
基于第一性原理铁合金的电化学腐蚀模型	
耐热钢中 Laves 相抗蠕变机制的 DFT/MD 计算	
SLM 工艺下不同特性粉末床的熔池性质计算	
低合金高强度钢焊接冷裂纹的预测模型	
Fe-Ni-Co 三元合金的高温高压相图	一等奖
等离子喷涂过程中粉末颗粒行为的数值模拟	
高强度钢氢损伤及其抑制手段的多尺度计算	
奥氏体不锈钢焊缝铁素体含量分布计算程序	
高强度钢在塑性波作用下非稳态组织演变模拟	
马氏体金相中奥氏体晶界的自动图像识别	
材料研发数据的区块链标记、分享和溯源	
典型金属材料高温高压相变计算	三等奖
不同底吹流量下喷嘴处气柱长度的计算方法	
氢还原铁矿(球团)气-固相间反应模型及其三维模拟	

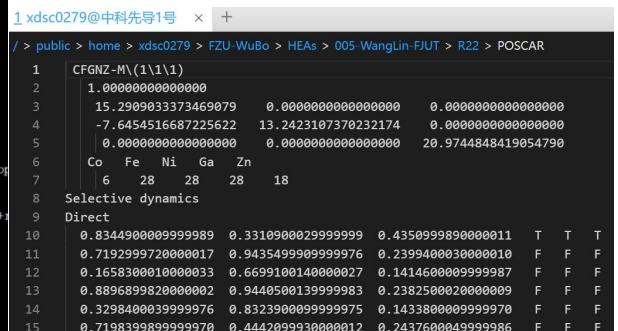
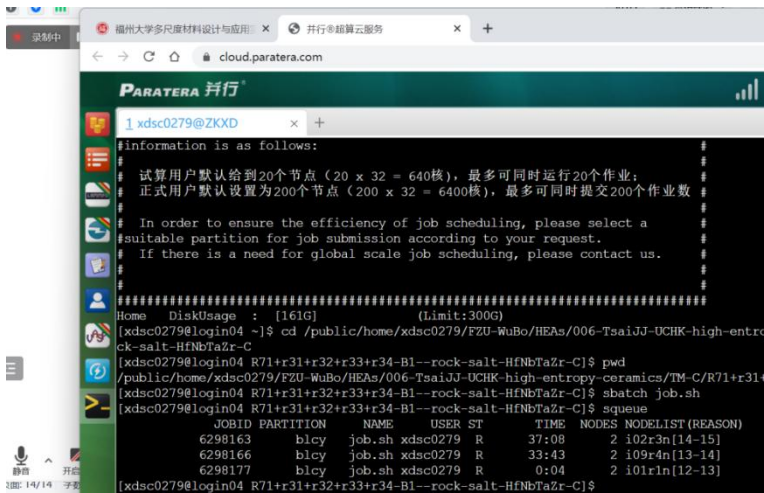
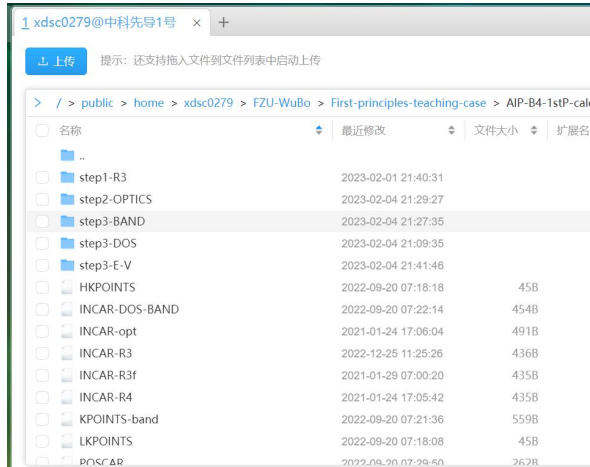
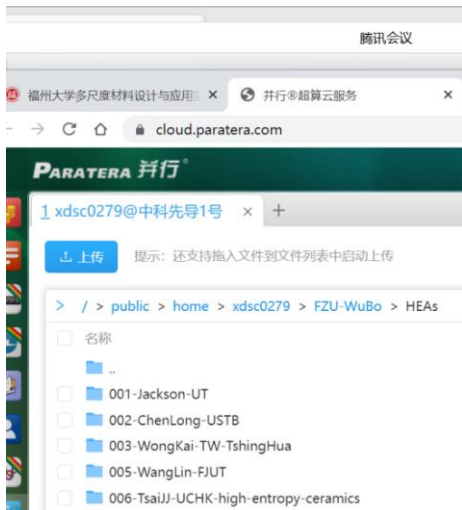
4. 博德科技学习运营平台及线下场地一瞥

公司网站信息 <http://www.bode-tech.cn/> <http://www.bode-tech.cn/list-25974-20631.html>



线上云计算,直接在主播账户上建立实战工作目录,利于及时跟踪和辅导

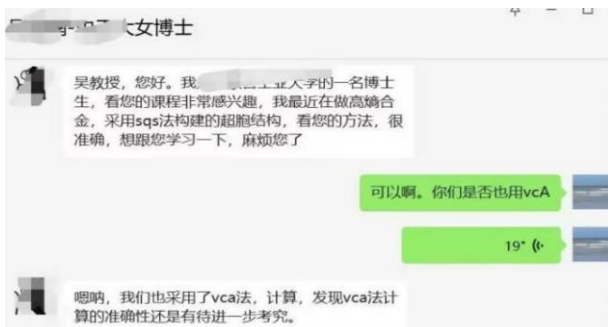
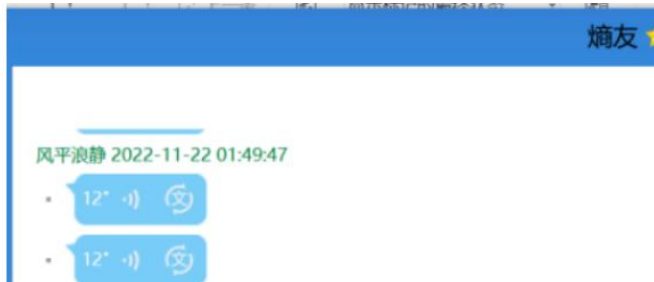
Glance the solution of the scheduled Online training in this special occasion 已授课展示



线下场地一瞥



互动交流



风平浪静(654489521) 13:24:55
部分同学进展和理解掌握很不错, 说明本身不难, 大家相互学习,
风平浪静(654489521) 13:26:17

其中, 福建师大吕明月 0 基础起步, 跑得比我快, 可以交个学友👍

风平浪静(654489521) 13:26:23
吕明月-福师大(1610034962) 13:31:37

主要是老师讲的好, 视频录的很清晰, 可以反复学习👍, 我才看了一点点,

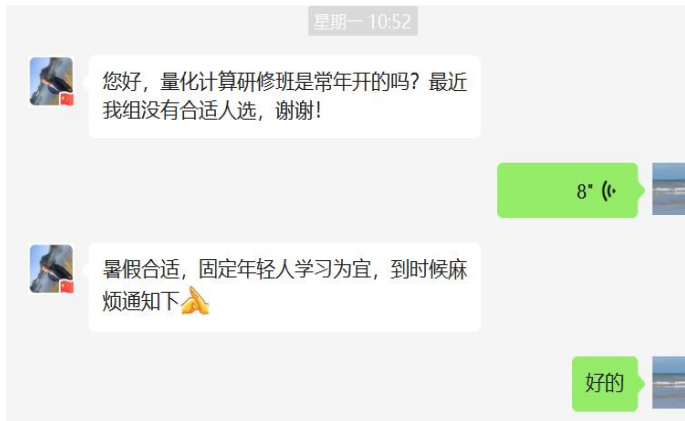
还有好多好多都还没学🙄, 以后还要多多学习👍, 谢谢老师🌹🌹🌹

上善若水三金男-上海大学 2022-12-25 21:29:39

我向导师汇报了试听您几次的授课情况, 导师非常鼓励我向您学习, 我已经报名参加了咱们的培训课程, 希望掌握高熵合金前沿计算模拟方法, 多出好成果。很期待, 老师辛苦啦!

风平浪静 2022-12-25 21:40:03

欢迎👏



Yangl-中国钢研 2023-02-27 21:31:23

主要是您讲得比较详细

Yangl-中国钢研 2023-02-27 21:31:55

确实能够帮助啥也不会的人员，快速了解上手

风平浪静 2023-02-27 20:54:26

你看看情况，嫌教学视频啰嗦的话，就直接上机练习。学起来快。

我有时间对有关视频剪辑一下，留下一次性干货，避免过多反复复习。

风平浪静 2023-02-27 20:54:52

适当重复复习是必须的，内容只讲一次，一般是记不住的

Yangl-中国钢研 2023-02-27 20:56:01

好的，近期我抓紧练习，很难得遇到像您这么负责的老师，真是传道受业解惑也！

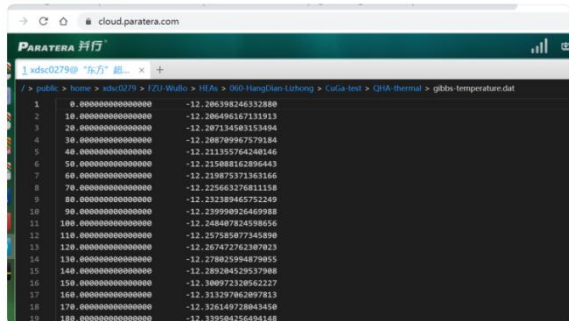
吴老师-高熵合金&高熵陶瓷CMS研修班

聊天 公告 相册 文件 应用 设置

风平浪静(654489521) 2023-04-17 18:31:19

新手上机练习一个

风平浪静(654489521) 2023-04-17 21:31:05



·很快上手了

李忠-杭电 <hanying880205@163.com> 2023-04-17 21:31:43



风平浪静(654489521) 12:36:23

如果有意介入计算模拟领域，不需要顾虑太多，新手也能分分钟驶入计算快车道，基本不需要什么前期基础，只需投入一丢丢小时间。五一假期我们将有效利用，收获宝贵数据和节日快乐！风平浪静(654489521) 12:36:23

BCC-HEA 漂亮合理结果 @唐宇-汕头大学

T=1873, P=100000, N=1, X(HF)=2E-1, X(CU)=2E-1, X(NB)=2E-1, X(TA)=2E-1

DEGREES OF FREEDOM 0

Total Gibbs energy -1.64408E+04, Enthalpy 7.99556E+01, Volume 0.00000E+00

Sublattice 1 Number of sites 0.5

CU 2.7528E-07 HF 3.2162E-02 NB 2.4234E-01 TA 3.4690E-01 W 3.7860E-01

Sublattice 2 Number of sites 0.5

CU 4.0000E-01 HF 3.6784E-01 NB 1.5766E-01 TA 5.3099E-02 W 2.1399E-02

Simulation Teaching and Training affairs and experience

Over 20 classes have been hosted by the supporting team, totally 800 attendees since 2014.

Also OPENNING Register for the well established training course, open class flexible in case need



国外国外:

很多人参加了培训，影响很大

论文档次提升了

毕业日期提前了

学术圈子扩大了

研究功力更足了

出国留学成功了

职业生涯明晰了

一个字：值！

两个字：超值！

1. 高熵合金四大效应定量化计算和图像化表征技术研修班
2. 材料、物理与化学高性能计算模拟实用技术研修班

火热报名中！线上线下同步开启，请预约报名（报名表相同），我们将适时举办。早学早用，早发表高水平文章。