福州博德科技--物质科学+高熵材料计算模拟--线上&线下研修培训和委托研究邀请函

1. 高熵合金四大效应定量化和图像化计算模拟专题培训

（独家绝活，系列方法论，底蕴深厚，论文目标导向）

2. 材料-物理-化学中的第一性原理计算为主的通用计算模拟方法入门与提高

合作模式

A 研修培训：主题互有交叉，按需侧重，一次注册，长期线上保驾护航，理解模型、掌握第一性原理计算+热力学计算方法，产出数据，直至论文发表)

B 委托研究：按期交付急需数据和图文描述，并讲懂说透，变成自己的论文核心部分

2024 年档期已定，敬请按需参与

寒假班（1.20-25） 五一班（5.2-6） 暑期一班（7.15-20）暑期二班 （8.15-20） 国庆班（10.3-7）

线下：每次 5 天（1-2 天酌情灵活安排），每天讲、练 3 小时， 高性能超算昼夜不停

线上：腾讯会议：每次 5 天（1-2 天酌情灵活安排），每天讲、练 3 小时，远程超算昼夜不停

网页资讯：**http://www.bode-tech.cn/article-25974-127120.html**

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

交流咨询 QQ 群：高熵及固态物质计算模拟咨询 QQ 群：**183881047**

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

线下地点：（福州大学城，根据人数妥善安排）

线上会议【风平浪静吴的个人会议室】 ：https://meeting.tencent.com/p/4618822069 会议密码：（即时发布）

培训费用：¥3000 元（含¥500 元超算机时费），鼓励学员掌握了基本方法后另立门户，在有关协议计算平台开户后，可获赠 **1000** 元机时费。

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，机时费 **500** 元。第三次来现场巩固提高者或第二次线上学者，仅付 **500** 元机时费，免交学费，

备注：原则上应自备 VASP，MS 及有关热力学软件版权或申请试用版，或以适当方式合作（按需求协商）

吴波教授应邀在有关平台进行直播公开课：基于原子择优占位行为定量化和图像化研究高熵合金四大效应新方法

提供永久回放，目前受众过 1.2 万人次，敬请按需收看。

曙光智算大讲堂（2023.08.14）回放链接 https://live.vhall.com/v3/lives/watch/119113381

特种铸造及有色合金-大咖来啦-直播平台（2023.11.24） 回放链接

https://mp.weixin.qq.com/s/Siz_JnV-BqYVN7g7FvX4Mw

邀请函

尊敬的老师和同学家人们好！

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。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。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计算和图像化表征（细分领域）的普及和提高贡献一份力量。

欢迎关注 2024 年的年度研修资讯，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。福州博德科技(福州博德研修会所)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....P11

3.首席教学和科研负责人简介... .....P17

4.线上线下教学研究条件简介... .....P20

5.互动交流... .....P21

6.报名登记表.....P23

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

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）

亦有其它友情合作超算平台，将陆续发布，供学员自主选择

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

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

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

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、韧脆性、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。（包教包会，长期在线辅导，欢迎到福州现场作文，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 combing 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：开课前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=Rln(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, sever 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=Rln (n) is used to describe the configuration entropy, which only represents the most ideal atomic arrangement mode, which 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



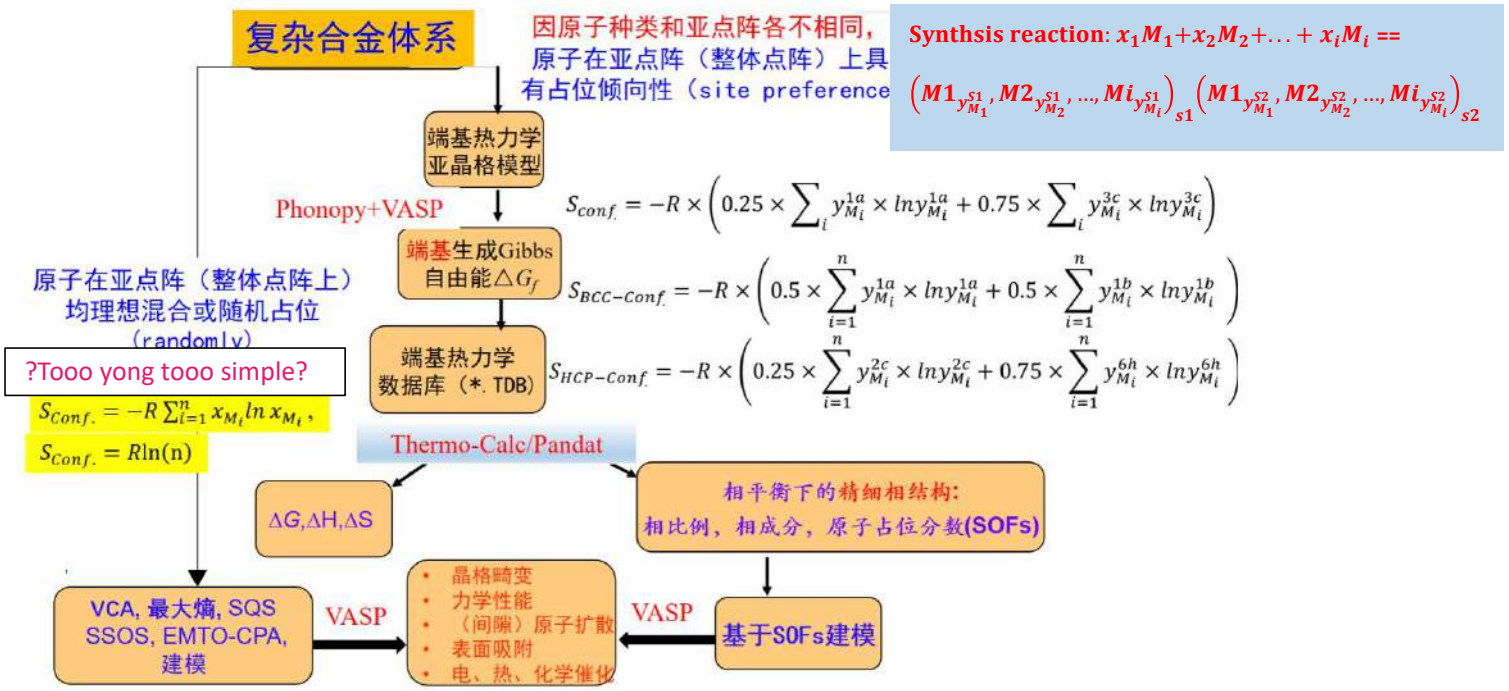


Fig. 3-1. Academic innovative and research flow chart of complex alloy phase with site occupying fractions.

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=b0136482fab4a2bd71b0766

243aafcba&chksm=e8a38a6edfd40378ac65c2e43ab3da29e11747444d2d5867124c6c9220dc135c058a416fbd9e&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_UF0eTnTZlMUFxg 】

【3】Rong Chen, LiangJi Weng, Chubo Zhang, Panhong Zhao, Longju Su, Tianliang Xie, Cheng Qian, Bo Wu*, Baisheng Sa, Cuilian Wen, Li Yang, Yu Liu, Chunxu Wang*, Xiaolan Yang, The influence of site preference on the thermodynamic and elastic properties of FCC_CoCrFeNi multi-principal element alloy, Journal of Alloys and Compounds 965 (2023) 171426. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.171426

【论文中文解读：https://mp.weixin.qq.com/s/01iMtfvEyia0Tv8tmY2k1A]

【4】Liangji Weng , Longju Su , Nengshen Xu , Chen g Qian , Qi Cai , Rong Chen, Yang Liu, Ya n Zhao, Feng Xu , Hami d Ali , Bo Wu* , Qiong Peng,**The preferred adsorption sites and catalyti c mechanis m of FCC_CoFeGaNiZn multi-principal element alloy for oxygen evolution reaction catalysis based on site preference of constituent atom on sublattice**,Intermetallics 165 (2024) 108132， doi:10.1016/j.intermet.2023.108132

【论文中文解读：https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzA3NjQ2NjQxNQ==&mid=2649473264&idx=1&sn=f397b19e2420a34708ade269e89822de&chksm=877fb170b0083866baef0e3b8d73e261faae0fe41412c8946b9b04284b4abbdafe79f8d9e7d8&mpshare=1&scene=23&srcid=1213C5b322wMXu3nbluNCzC8&sharer_shareinfo=58739f0b492b9684d8ce9b1ab5cc6a44&sharer_shareinfo_first=fbbfa0c4f1001b03c4541c77dc4776b3#rd 】

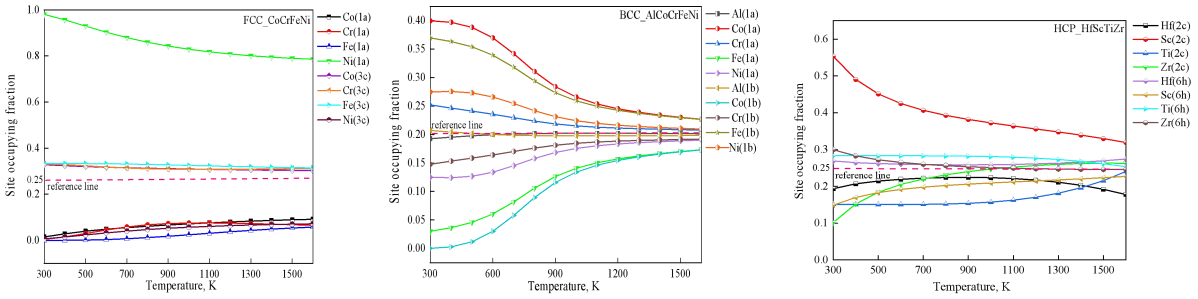
[5] Chubo Zhang, Panhong Zhao, Rong Chen, Bo Wu*， Yang Qiao， LiangJi Weng, Longju Su, Tianliang Xie, Cheng Qian, Baisheng Sa* ,Yu Liu, Chunxu Wang, **Significant influence of ordering behaviors on the thermodynamic and mechanical properties of multi-principle element alloys： A theoretical evidence on FCC-CoNiV**, Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2024 (minor revise)

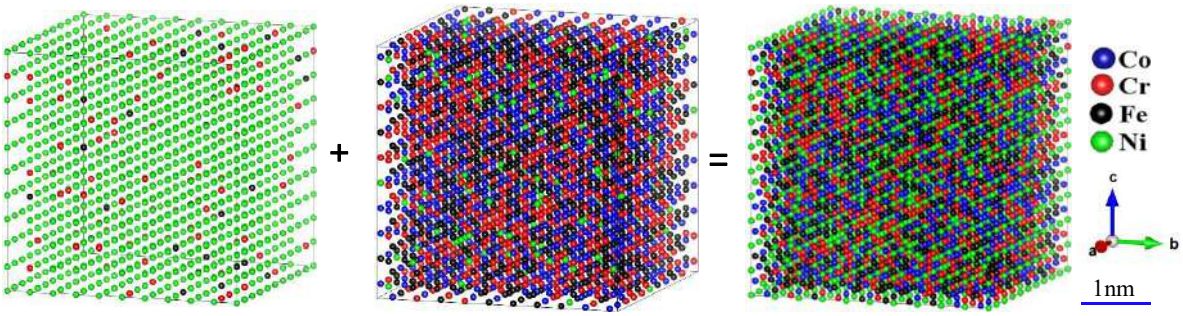
【6】 Bo Wu* , Zheyu Xie, Jinchang Huang, Jinwei Lin, Yixu Yang, Linqiao Jiang, Jianglin Huang, Guoxin Ye, Chunfeng Zhao, Shangjin Yang, Baisheng Sa, **Microstructures and thermodynamic properties of high-entropy alloys CoCrCuFeNi**, *Intermetallics* 93 (2018) 40–46. , https://doi.org/10.1016/j.intermet.2017.10.018

【7】 谢哲宇，吴 波* ，黄锦长，杨义许，李皎亮，**多主元高熵合金 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）

【8】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. （JW Yeh said this is the first first-principles calculation paper on HEAs)

3.2.图文案例

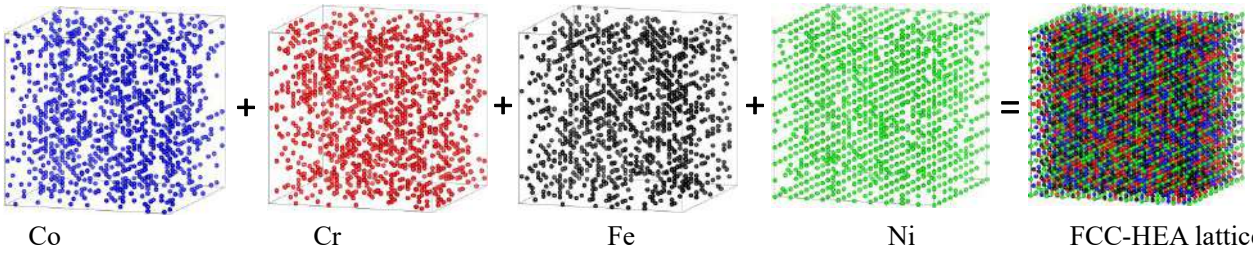




1a sublattice in 10×10×10 supercell 3c sublattice in 10×10×10 supercell 10×10×10 supercell of FCC structure

$(Co_{0.0705}Cr_{0.0750}Fe_{0.0229}Ni_{0.8316})_{1a} + (Co_{0.3098}Cr_{0.3083}Fe_{0.3257}Ni_{0.0562})_{3c} = (Co_{0.0705}Cr_{0.0750}Fe_{0.0229}Ni_{0.8316})_{1a}(Co_{0.3098}Cr_{0.3083}Fe_{0.3257}Ni_{0.0562})_{3c}$

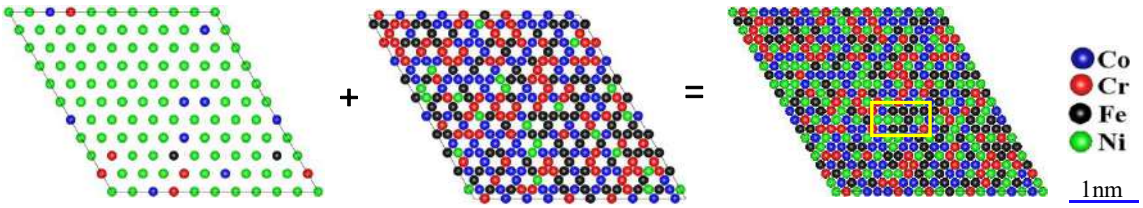
$Co_{71}Cr_{75}Fe_{23}Ni_{831} + Co_{929}Cr_{925}Fe_{977}Ni_{169} = Co_{1000}Cr_{1000}Fe_{1000}Ni_{1000}$



Co Cr Fe Ni FCC-HEA lattice



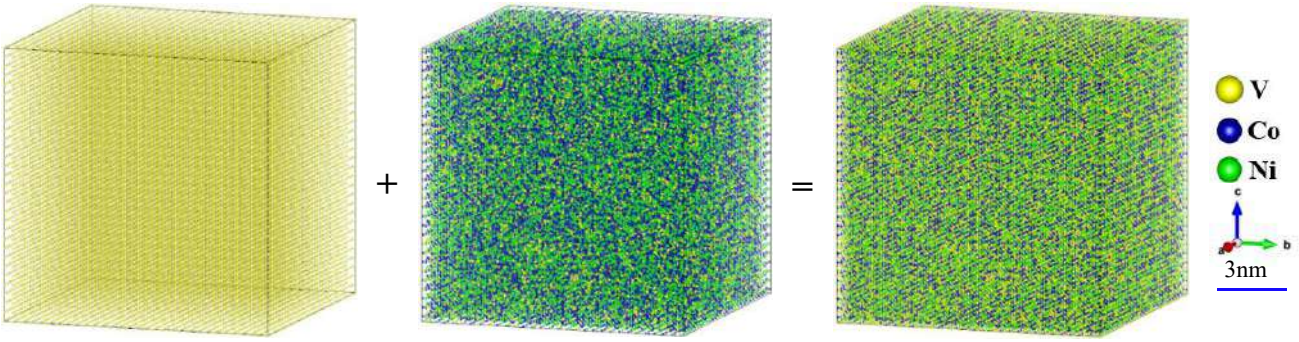
Co Cr Fe Ni Crystal face



1a (111) 3c (111) Crystal face (111)

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.



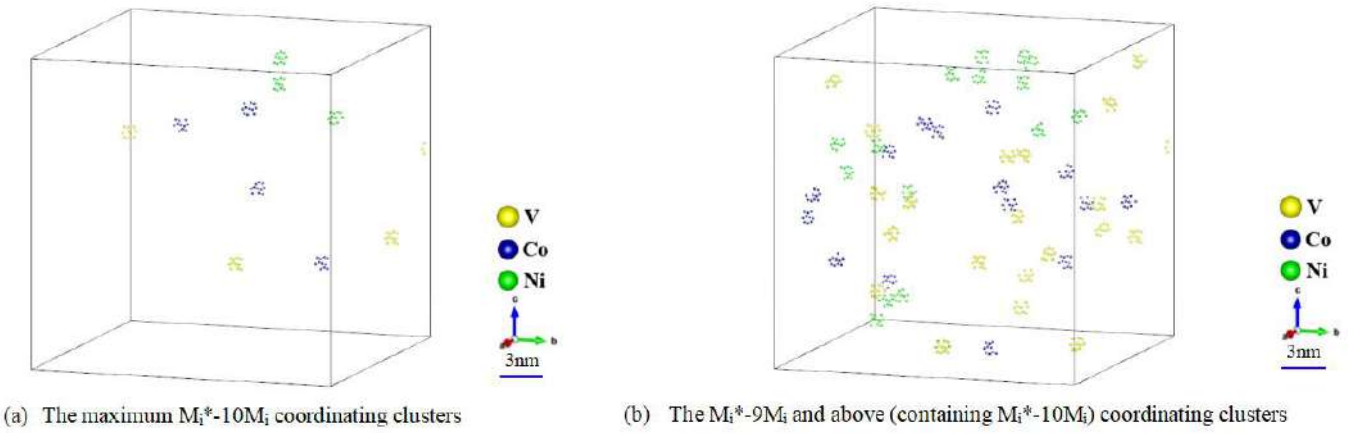
1a sublattice in 30×30×30 supercel 3c sublattice in 30×30×30 supercell 30×30×30 supercell of FCC structure

$(V_{1.0000})_{1a}+(Co_{0.4445}Ni_{0.4444}V_{0.1111})_{3c}= (V_{1.0000})_{1a}(Co_{0.4445}Ni_{0.4444}V_{0.1111})_{3c}$

$V_{27000} + Co_{36000}Ni_{36000}V_{9000} = Co_{36000}Ni_{36000}V_{36000}$

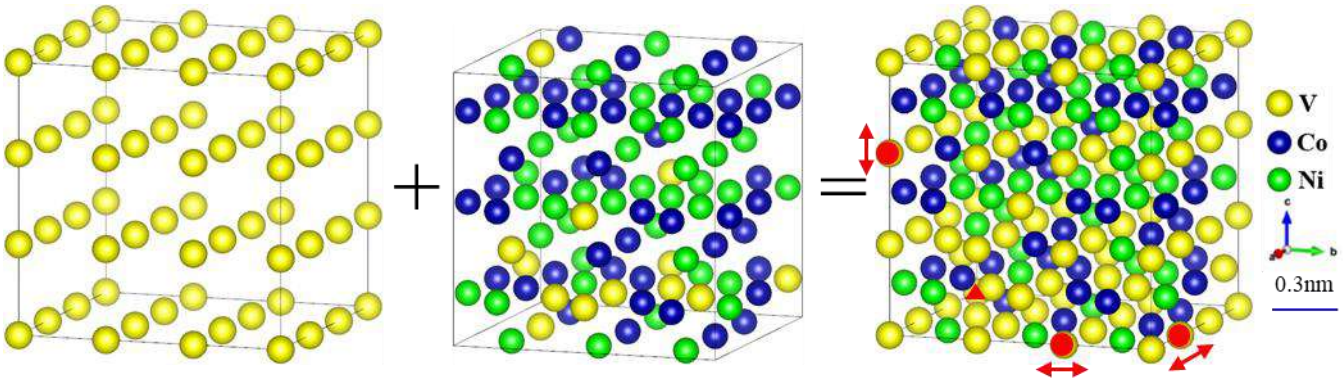
(c) Construction of a 30×30×30 FCC supercell based on the prototype of $L1_2$_$AuCu_3$ for FCC_CoNiV MEA at all

temperature



(a) The maximum M_i*-10M_i coordinating clusters (b) The M_i*-9M_i and above (containing M_i*-10M_i) coordinating clusters

Fig. 11. The maximum M_i*-10M_i coordinating clusters in a hypothesized randomly mixing configuration of FCC_CoNiV MPA with a 30×30×30 FCC supercell based on the prototype of $L1_2$_$AuCu_3$ containing 108,000 atoms

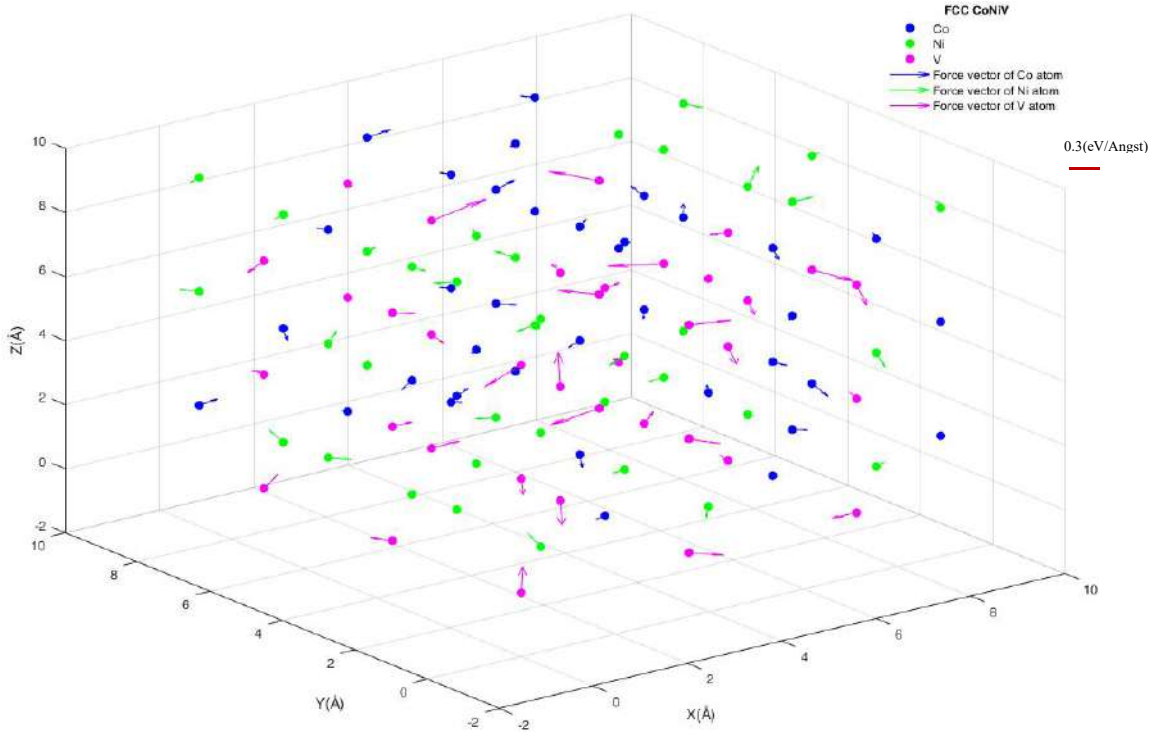


1a sublattice in 3×3×3 supercel 3c sublattice in 3×3×3 supercell 3×3×3 supercell of FCC structure

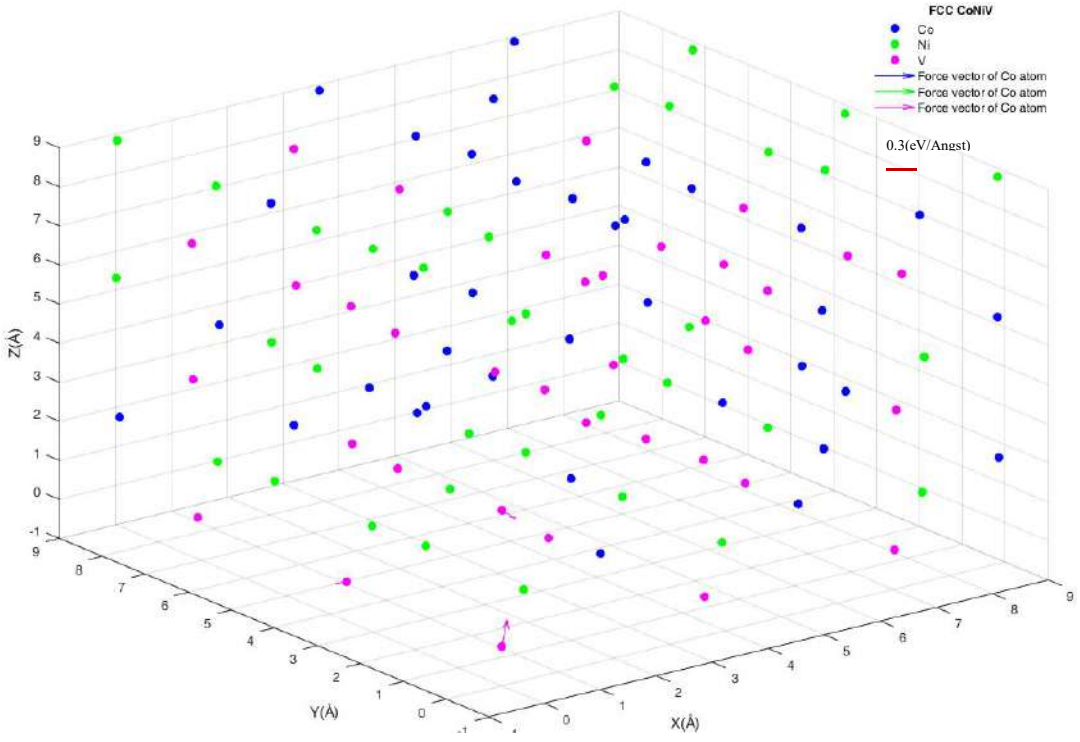
$(V_{1.0000})_{1a}+(Co_{0.4445}Ni_{0.4444}V_{0.1111})_{3c}=(V_{1.0000})_{1a}(Co_{0.4445}Ni_{0.4444}V_{0.1111})_{3c}$

V_{27} + $Co_{36}Ni_{36}V_9$ = $Co_{36}Ni_{36}V_{36}$

Fig. 12 A3×3×3 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.

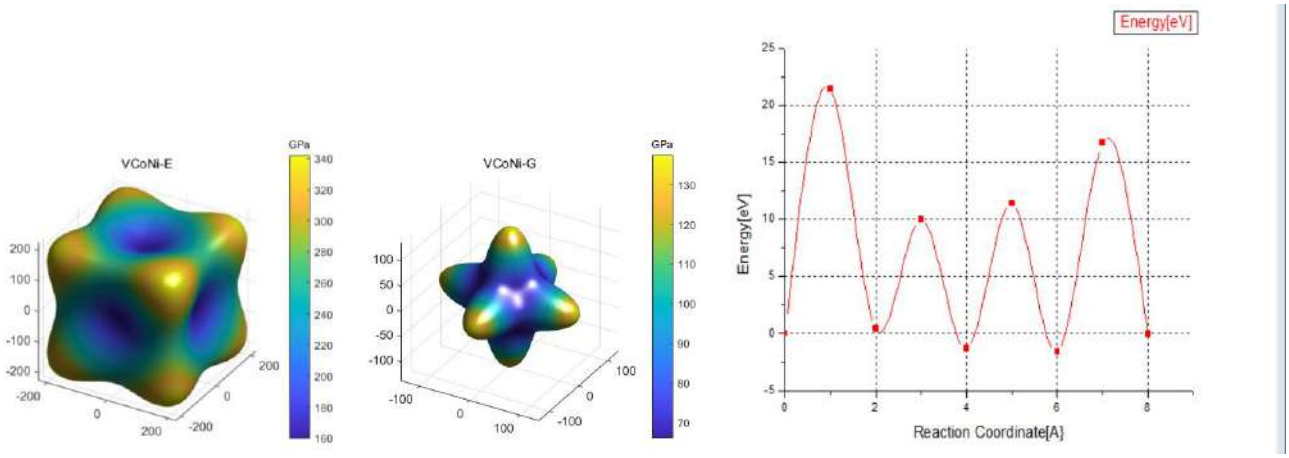


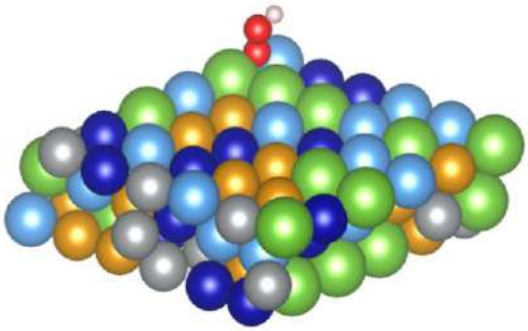
(a) Driven force of lattice distortion analyzed from the resultant force acting on each atom of the FCC_CoNiV MPEA without lattice distorting after volume relaxing only (R7)

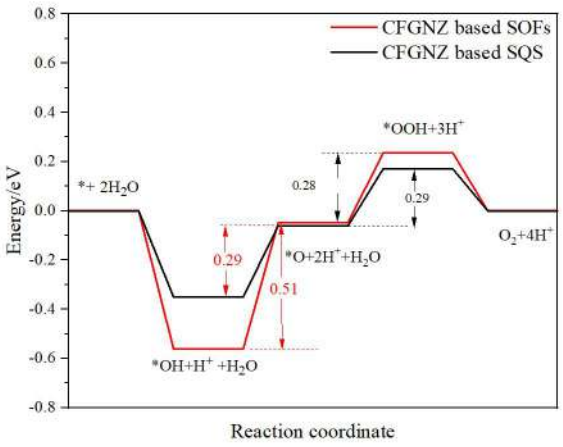


(b) Driven force of lattice distortion analyzed from the resultant force acting on each atom of the FCC_CoNiV MPEA with lattice distorting by full relaxing (R3, volume, shape and atom positions were allowed to relax)

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												
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-band-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，统计团簇，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Materiasl 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）
月-市大	√	√	√	√	√	√	√	√	√	√	doing	doing
-华科大	√	√	√	√	√	√	√	√	√	to do	doing	doing

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

2024 年档期已定，敬请按需参与

寒假班（1.20-25） 五一班（5.2-6） 暑期一班（7.15-20）暑期二班 （8.15-20） 国庆班（10.3-7）

线下模式：每次 5 天（1-2 天酌情灵活安排），每天讲、练 3 小时， 高性能超算昼夜不停

线上模式：腾讯会议：每次 5 天（1-2 天酌情灵活安排），每天讲、练 3 小时，远程超算昼夜不停

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

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

交流咨询 QQ 群：高熵及固态物质计算模拟咨询 QQ 群：183881047

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

地线下点：福州大学城

线上会议【风平浪静吴的个人会议室】 ：https://meeting.tencent.com/p/4618822069 会议密码：（即时发布）

培训费用：¥3000 元（含¥500 元超算机时费），鼓励学员掌握了基本方法后另立门户，在有关协议计算平台开户后，可获赠 1000 元机时费。

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，机时费 500 元。第三次来现场巩固提高者或第二次线上学者，仅付 500 元机时费，免交学费，

备注：原则上应自备 VASP，MS 及有关热力学软件版权或申请试用版，或以适当方式合作（按需求协商）

吴波教授应邀在有关平台进行直播公开课：基于原子择优占位行为定量化和图像化研究高熵合金四大效应新方法

提供永久回放，目前受众过 1.2 万人次，敬请按需收看。

曙光智算大讲堂（2023.08.14）回放链接 https://live.vhall.com/v3/lives/watch/119113381

特种铸造及有色合金-大咖来啦-视频号直播平台 （2023.11.24） 回放链接

https://mp.weixin.qq.com/s/Siz_JnV-BqYVN7g7FvX4Mw

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 1000 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！

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“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,$CH_3CH_2NH_2SnI_3$ 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,$CH_3CH_2NH_2SnI_3$ 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,TiO2 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_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 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、异质结构建与计算模拟
	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）
	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
D4	13:00-20:00 户外拓展 (挑选好天气)	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。
	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）
D5	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
	8:30-9:20	自主计算与研究

D6	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】-【8】 High Entropy **Alloys related refer to Page 6**

[9] 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.

[10] Qiong Peng, Kangming Hu, Baisheng Sa*, Jian Zhou, Bo Wu*, Xianhua Hou, Zhimei Sun*. Unexpected elastic isotropy in a black phosphorene/TiC_2 van der Waals heterostructure with flexible Li-ion battery anode applications, Nano Research, 2017, 10, 3136-3150.

[11] Qiong Peng, Zhenyu Wang, Baisheng Sa*, Bo Wu* and Zhimei Sun, Blue Phosphorene/MS_2 (M = Nb, Ta) Heterostructures As Promising Flexible Anodes for Lithium-Ion Batteries, ACS Appl. Mater. Interfaces 2016, 8, 13449−13457

[12] 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

[13] 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.

[14] 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.

[15] *Bo Wu, Hailong Liu, Chaoran Huang, et al., Prediction of the site ordering behaviours of elements in C15 $NbCr_2$-based

intermetallics by combining thermodynamic model with ab-initio calculation. *Intermetallics*. 2013, 35: 104-109.

[16] 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 研究员,西安近代化学研究所，福大硕士，东南大学化工学院博士

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 CHN_7 and CHN_3, Journal of Molecular Graphics and Modelling,2018,84: 10-17.

[2] Tao Yu, Wu Bo*. A theoretical prediction on CN_6O: 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-N_7O^+,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.

助教：彭琼特聘教授： 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** 余篇高水平论文。

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，超算机时费**¥500** 元、茶歇、招待宴（**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)】

陪同亲属：**¥300** 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。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 **5** 折优惠，并有机会享受前述折上折。**Email:** info@bode-tech.cn 654489521@qq.com **13023819517**（吴老师）

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

吴睿先生：福州博德科技行政副总，**QQ:495502272@qq.com**; 手机微信：**13691685245**

八、缴费方式：

报名后请及时支付，以便即刻安排线上预学习

（公对公转账，或个人支付订金（私对私，私对公均可），报账后退回个人订金）

或出具签字拍照的承诺函发研修助理留存

本人确保集中培训后，**3** 个月内完成财务转账事宜。学员签名： 日期：

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）

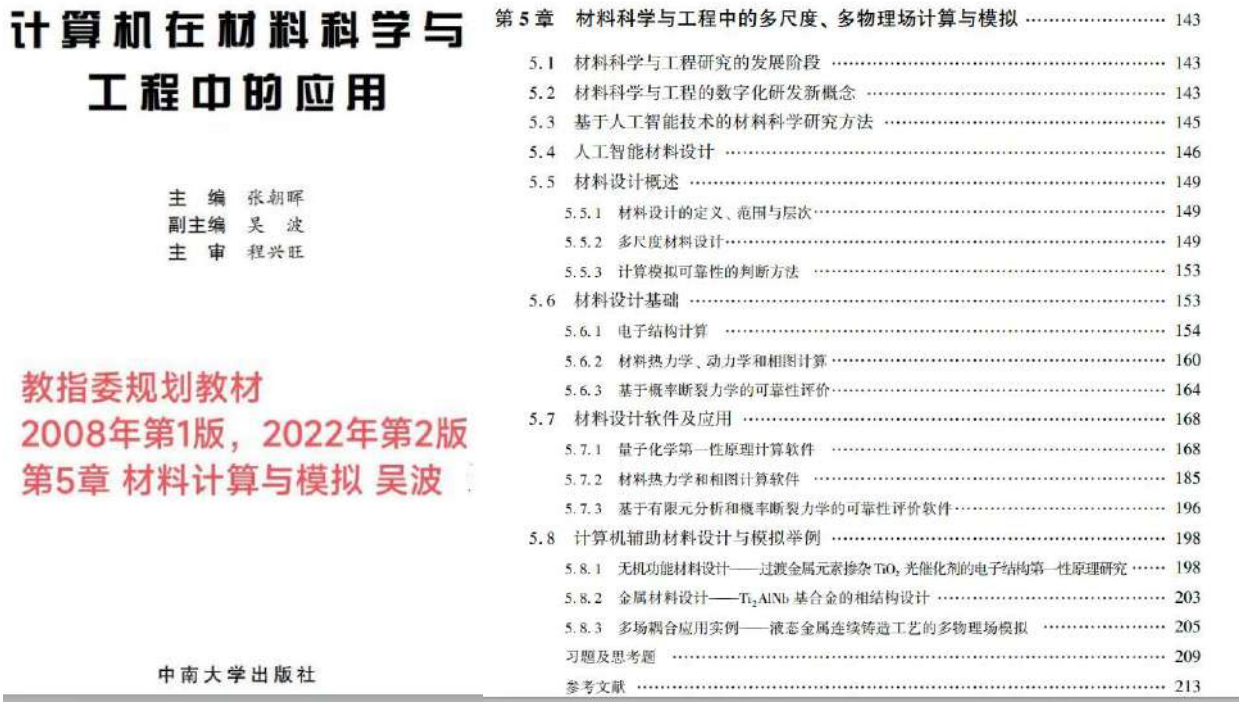
（自费学习者，不需要开具发票，可根据路程远近，学历等因素酌情优惠报名费）

3.首席教学和科研负责人简介



吴波，博士，留德博士后，2006 年任教福州大学，2007 年教授，2011 年博导、2024 年二级教授。

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 4 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 3 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。



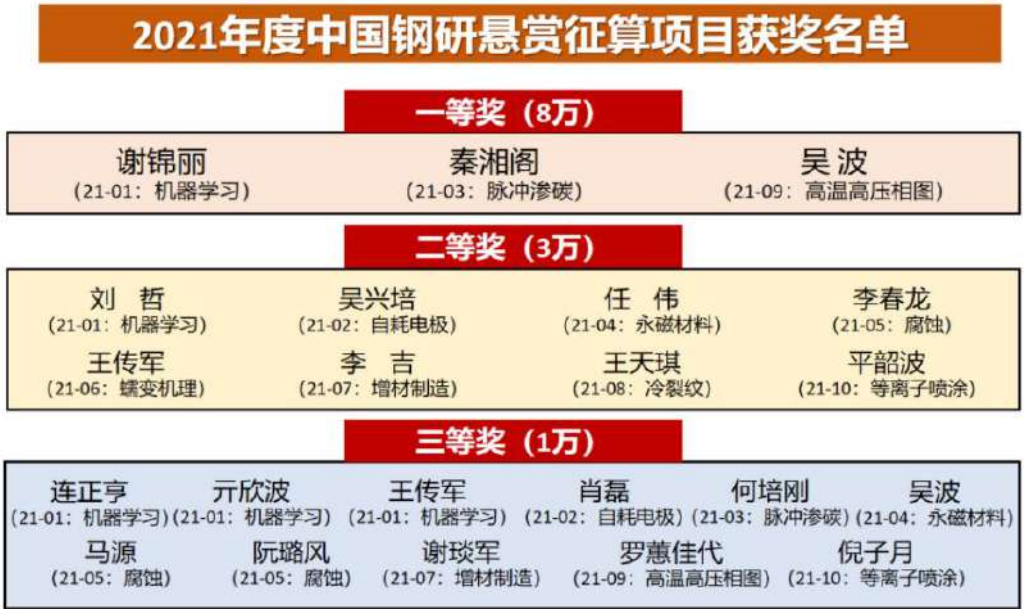
计算机在材料科学与工程中的应用

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_2AlNb 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	秦湘阁	吴 波
(21-01：机器学习)	(21-03：脉冲渗碳)	(21-09：高温高压相图)

二等奖（3万）

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

三等奖（1万）

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



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	
太空电梯缆索材料设计	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	

吴波教授应邀在有关平台进行直播公开课：基于原子择优占位行为定量化和图像化研究高熵合金四大效应新方法

提供永久回放，目前受众过 1.2 万人次

曙光智算大讲堂（2023.08.14）回放链接 https://live.vhall.com/v3/lives/watch/119113381

特种铸造及有色合金-大咖来啦-视频号直播平台 2023.11.24 回放链接 https://mp.weixin.qq.com/s/Siz_JnV-BqYVN7g7FvX4Mw



4.博德科技学习运营平台及线下场地一瞥

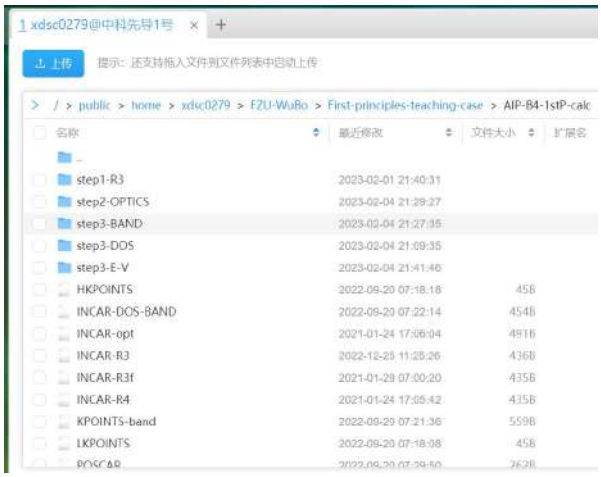
公司网站信息 http://www.bode-tech.cn/ http://www.bode-tech.cn/list-25974-20631.html

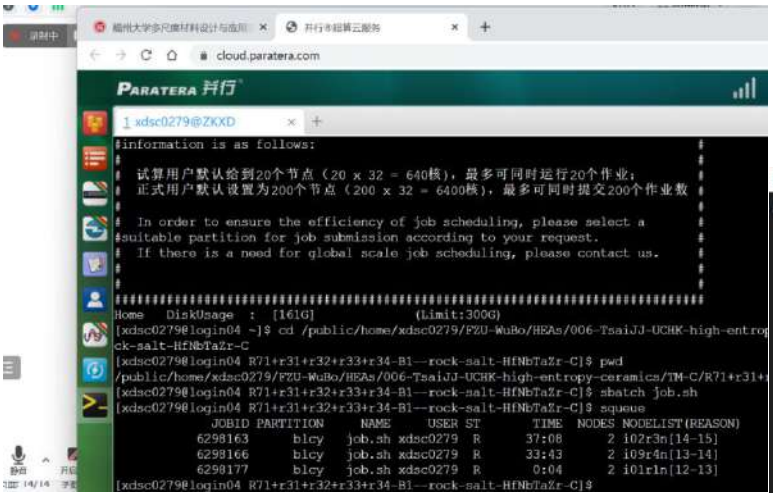


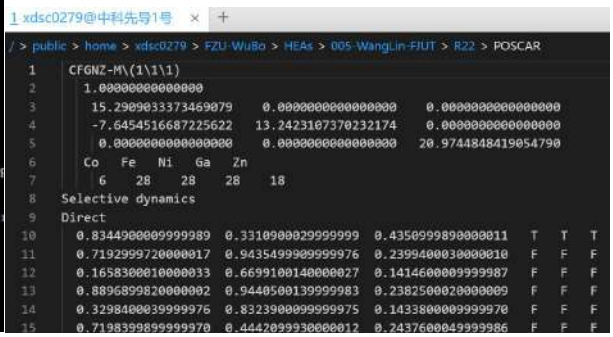
线上云计算,直接在主播账户上建立实战工作目录，利于及时跟踪和辅导

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

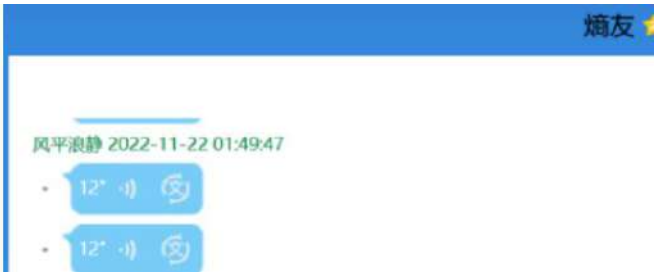


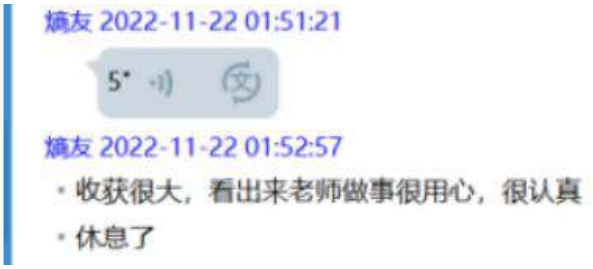






互动交流







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，一般人是记不住的
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人的老师，真是传道受业解惑也！



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。51 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



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。

福州博德科技--物质科学计算模拟--线上&线下培训

报名登记表 Register form

Email to : info@bode-tech.cn　　wubo@fzu.edu.cn

（酌情填写有关信息，主办方承诺信息安全，不泄露、不滥用）

第一性原理计算为主的通用计算模拟方法（　）

高熵合金高熵陶瓷四大效应定量化和图像化计算模拟（　　）

线上（）/ 线下（　）　混合式（）　均可（　）

寒假班（1.20-25） 五一班（5.2-6） 暑期一班（7.15-20）暑期二班 （8.15-20） 国庆班（10.3-7）

寒假班（ ）五一班（ ）；暑期班（ ）；国庆班 （ ）

每次（讲练）5-7 天，每天讲课 3-4 小时，实战练习 4-5 小时（超算昼夜不停）

(一次注册，长期线上保驾护航，直至论文发表)

姓名 Name	
单位 affiliation	
学员类别 Academic degree level　（本科生、硕士生、博士生、教师）+（在读生导师姓名）	
性别 (Sex)	
Email address	
联系电话	
联系 QQ	
微信号	
有无 VASP 经验　experience of VASP	
有无热力学软件经验　experience of computational thermodynamics	
拟解决的主要问题 main puzzle	
发票类型:提供普通电子发票，如需要增值税专用发票请联系会务助理；可出具盖章版的会议通知、邀请函、参加证明等支撑文件	会议费( ) 培训费( ) 计算服务费( ) 加工费( )　测试费( )　其他：_____
单位名称及统一社会代码识别号	
培训信息来源	朋友推荐( ) 邮件通知( ) 微信/QQ( ) 其他( )
如参加线下培训，是否需要以下协助？	代订协议价宾馆（ ） 推荐房间合住需求学员（ ）

备注：1、缴费支持公对公转账，个人垫付可开具垫付证明，如报销需对公转账，到账后会及时退还垫付费用

2、如自费不需要发票，可减免 200 元；三人团体报名优惠 100 元/人（返现）。

友情支持单位：福州大学多尺度材料设计与应用实验室

主办和后勤协助单位：福州博德新材料科技有限公司 纳税人识别号：91350100399368623B

开户行：中国工商银行福州金山支行　　银行账号：1402267709600106909

注册地址：福州高新区福州国家留学人员创业园 公司网址：www.bode-tech.cn

业务地址：福州大学城/福州西海岸广场 A1-903