

《北京交通大学公派研究生项目申请表》

姓名	许来	学号	22110318	性别	男	出生日期	19981126
入学年月	202209		录取类别				
推荐部门	物理科学与工程学院		就读专业	力学	指导教师	郭雅芳	
所属重点学科			所属科研团队/基地/平台				
联系方式	13917215094		邮箱	22110318@bjtu.edu.cn			
出访国家	日本		出访学校/机构	大阪大学			
外方指导教师	Shigenobu Ogata		拟访学/就读专业	力学			
申请人外语水平	教育部指定出国留学人员培训部高级班结业证书		拟出访时间	2024-09-01至2026-08-31			
申请类别	联合培养博士生						
博士论文研究方向	多组元合金结构性质及力学性能的分子动力学表征						
研修计划的简要说明	<p>研修计划由郭雅芳教授和尾方成信（Shigenobu Ogata）教授共同制订。主要内容包括研究课题、研究背景、研究内容、现阶段进展、出国期间的预期目标和回国后的工作等内容。研究课题为《多主元合金化学序与力学变形的分子动力学模拟》，本研究基于郭雅芳教授课题组以及尾方成信教授课题组在分子动力学模拟以及机器学习势函数领域的积累，具有较高的创新性和可行性。</p> <p>研究背景：多主元合金（MEPA）包括中熵合金、高熵合金是由三种及以上主要元素组成。MEPA在全球范围内为合金设计创造了巨大的动力，这在冶金研究上是前所未有的。多主元合金由于其多主元组分具有独特性质，包括高强度和硬度，优异的耐磨性，良好的结构稳定性、耐腐蚀和抗辐射性能。部分性能是传统合金所不具备的，这使得其在许多领域颇具吸引力，诸如航空航天、民用基础设施和能源部门等。其的优异性能可以归功于固溶强化、晶界强化，以及第二相形成产生的沉淀强化。由于中、高熵合金自身微结构特征的复杂性，建立相应的原子结构模型能够定量地分析结构特征对材料属性及其性能的影响对新型高性能结构材料的设计进程有加速作用。多主元合金的理想固熔体理论基础在近年来受到挑战，最新的理论计算与实验结果显示不同元素的原子在晶格格点上的排布并不是随机无序的，而是呈现一定的近程-中程化学有序特征，并且此局域化学有序会显著影响中、高熵合金的性能。</p> <p>为了更好的理解并设计高性能的多主元合金，合金中的结构演化行为仍需用丰富的原子模拟手段深入研究。研究材料变形过程中缺陷成核及其演化最直接的方法是建立分子动力学原子模型 (molecular dynamic simulation, MD), 在大规模和时间跨度上进行模拟分析。MD模拟的精度及效率取决于计算原子能量及力场时所选取的用于描述原子间相互作用的势函数, 这是目前在建立多主元合金 MD 模型时面临的重大问题。由于元素种类丰富且含量较大, 描述元素之间的相互作用对模拟的结果至关重要, 目前描述原子间作用的传统势函数（如EAM势、LJ势、MEAM势）相较于第一性原理差距较大, 因而目前一些研究采用了机器学习势函数的方法, 通过第一性原理的计算结果建立势函数以表征相互作用。由于第一性原理的计算构形对学习生成的势函数描述的准确度有密切的联系, 大部分的机器学习势函数没有将缺陷的过渡态加入计算导致势函数在某些缺陷演化（如空位, 位错运动）的描述上并不准确。同时随着元素种类的增加, 所需要训练的构形的数量大大上升, 因而在常见的多主元合金体系如难熔高熵合金（Nb-Mo-Ta-W）, Cantor合金（Fe-Co-Ni-Cr-Mn）等体系中依然缺少较好的机器学习势函数。</p> <p>在建立了合适的势函数后, 可以通过MD结合蒙特卡罗（Monte Carlo, MC）方法研究局部化学有序结构的本质及其形成对材料缺陷演化的影响, 这些微结构的存在会造成材料塑性变形机理的转变, 从而影响到材料的力学性能。已有研究证实, 位错和空位的运动、材料堆垛层错能等均会随着化学序的变化而变化。因而, 本研究旨在揭示多主元合金化学序结构的本质和其对材料的塑性变形的影响。</p> <p>研究重点是在原子水平上通过蒙特卡罗（MC）, 分子动力学方法（MD）, 过渡态计算（NEB）, 第一性原理（DFT）以及机器学习势函数等方法的帮助理解多主元合金的力学变</p>						

形行为以及化学序的对变形机制的影响。

主要内容包括三部分:

1. 通过第一性原理以及过渡态计算数据训练出多主元体系的机器学习势函数
2. 通过机器学习势函数进行分子动力学模拟，研究不同的多主元合金化学序结构特征。
3. 比较化学序对不同合金中各种缺陷如空位，位错的运动机制的变化。分析这些机制变化对材料的力学性能的影响。

计划时间安排如下：

2024.09---2024.12: 用第一原理方法计算多主元合金体系（Nb-Mo-Ta-W, Fe-Co-Ni-Cr-Mn等）所需要的构形数据，包括过渡态计算中产生的构形。

2025.01---2025.04: 学习使用机器学习方法建立多主元合金体系的神经网络势函数（NNIP）

2025.05---2025.09: 使用势函数进行分子动力学模拟，关注不同多主元合金的化学序的特征。

2025.09---2025.12: 通过分子动力学模拟，分析不同多主元合金的化学序对缺陷机制的变化（如位错运动，空位扩散等），分析这些机制对材料的力学性能的影响。

2026.01---2026.08: 总结研究结果并撰写论文。完成对研究的必要修改和完善，并准备向期刊投稿；为今后的工作进行多尺度原子模拟方法的文献调研。

回国后计划开展以下研究：

1. 通过机器学习势函数的建立以及第一性原理的计算结果，研究长时间尺度下缺陷的演化。
2. 对其他多主元合金体系利用国内外的学习成果进行更深入的研究。
3. 对研究进行必要的改正，撰写并投稿论文。

申请人签字：

- Zincphilic Alloy Anode for Aqueous Zn Battery[J/OL] . *Advanced Science*, n/a(n/a): 2307667.
- [2] XIE H, WEI G, DU J P, 等. Shuffling pathway of anti-twinning in body-centered-cubic metals[J/OL] . *Scripta Materialia*, 2024, 246: 116083.
- [3] LI L, DU J P, OGATA S, 等. Variation of first pop-in loads in nanoindentation to detect chemical short-range ordering in the equiatomic Cr-Co-Ni medium-entropy alloy[J/OL] . *Acta Materialia*, 2024, 269: 119775.
- [4] XIE H, WEI G, DU J P, 等. Shuffling pathway of anti-twinning in body-centered-cubic metals[J/OL] . *Scripta Materialia*, 2023, 222: 114999.
- [5] DU J P, GENG W T, ARAKAWA K, 等. Hydrogen-Enhanced Vacancy Diffusion in Metals[J/OL] . *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020, 11(17): 7015-7020.
- [6] MENG F S, DU J P, SHINZATO S, 等. General-purpose neural network interatomic potential for the α -iron and hydrogen binary system: Toward atomic-scale understanding of hydrogen embrittlement[J/OL] . *Physical Review Materials*, 2021, 5(11): 113606.
- [7] XIE D G, NIE Z Y, SHINZATO S, 等. Controlled growth of single-crystalline metal nanowires via thermomigration across a nanoscale junction[J/OL] . *Nature Communications*, 2019, 10(1): 4478.
- [8] DU J P, YU P, SHINZATO S, 等. Chemical domain structure and its formation kinetics in CrCoNi medium-entropy alloy[J/OL] . *Acta Materialia*, 2022, 240: 118314.
- [9] ZHENG S, SHINZATO S, OGATA S, 等. Experimental molecular dynamics for individual atomic-scale plastic events in nanoscale crystals[J/OL] . *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2022, 158: 104687.
- [10] YU P, FENG R, DU J, 等. Phase transformation assisted twinning in a face-centered-cubic FeCrNiCoAl_{0.36} high entropy alloy[J/OL] . *Acta Materialia*, 2019, 181: 491-500.
- [11] YANG X S, WANG Y J, ZHAI H R, 等. Time-, stress-, and temperature-dependent deformation in nanostructured copper: Creep tests and simulations[J/OL] . *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2016, 94: 191-206.
- [12] SATO Y, SHINZATO S, OHMURA T, 等. Unique universal scaling in nanoindentation pop-ins[J/OL] . *Nature Communications*, 2020, 11(1): 4177.
- [13] VERMA A, JOHNSON O K, THOMPSON G B, 等. Insights into factors that affect non-Arrhenius migration of a simulated incoherent $\Sigma 3$ grain boundary[J/OL] . *Acta Materialia*, 2023, 258: 119210.
- [14] SHINZATO S, WAKEDA M, OGATA S. An atomistically informed kinetic Monte Carlo model for predicting solid solution strengthening of body-centered cubic alloys[J/OL] . *International Journal of Plasticity*, 2019, 122: 319-337.
- [15] SHEN Z, DU J P, SHINZATO S, 等. Kinetic Monte Carlo simulation framework for chemical short-range order formation kinetics in a multi-principal-element alloy[J/OL] . *Computational Materials Science*, 2021, 198: 110670.
- [16] YU P, DU J P, SHINZATO S, 等. Theory of history-dependent multi-layer generalized stacking fault energy— A modeling of the micro-substructure evolution kinetics in chemically ordered medium-entropy alloys[J/OL] . *Acta Materialia*, 2022, 224: 117504.
- [17] MIYOSHI H, KIMIZUKA H, ISHII A, 等. Temperature-dependent nucleation kinetics of Guinier-Preston zones in Al-Cu alloys: An atomistic kinetic Monte Carlo and classical nucleation theory approach[J/OL] . *Acta Materialia*, 2019, 179: 262-272.
- [18] LIAO H, KIMIZUKA H, ISHII A, 等. Nucleation kinetics of the β'' precipitate in dilute Mg-Y alloys: A kinetic Monte Carlo study[J/OL] . *Scripta Materialia*, 2022, 210: 114480.
- [19] MIYOSHI H, KIMIZUKA H, ISHII A, 等. Competing nucleation of single- and double-layer Guinier-Preston zones in Al-Cu alloys[J/OL] . *Scientific Reports*, 2021, 11(1): 4503.