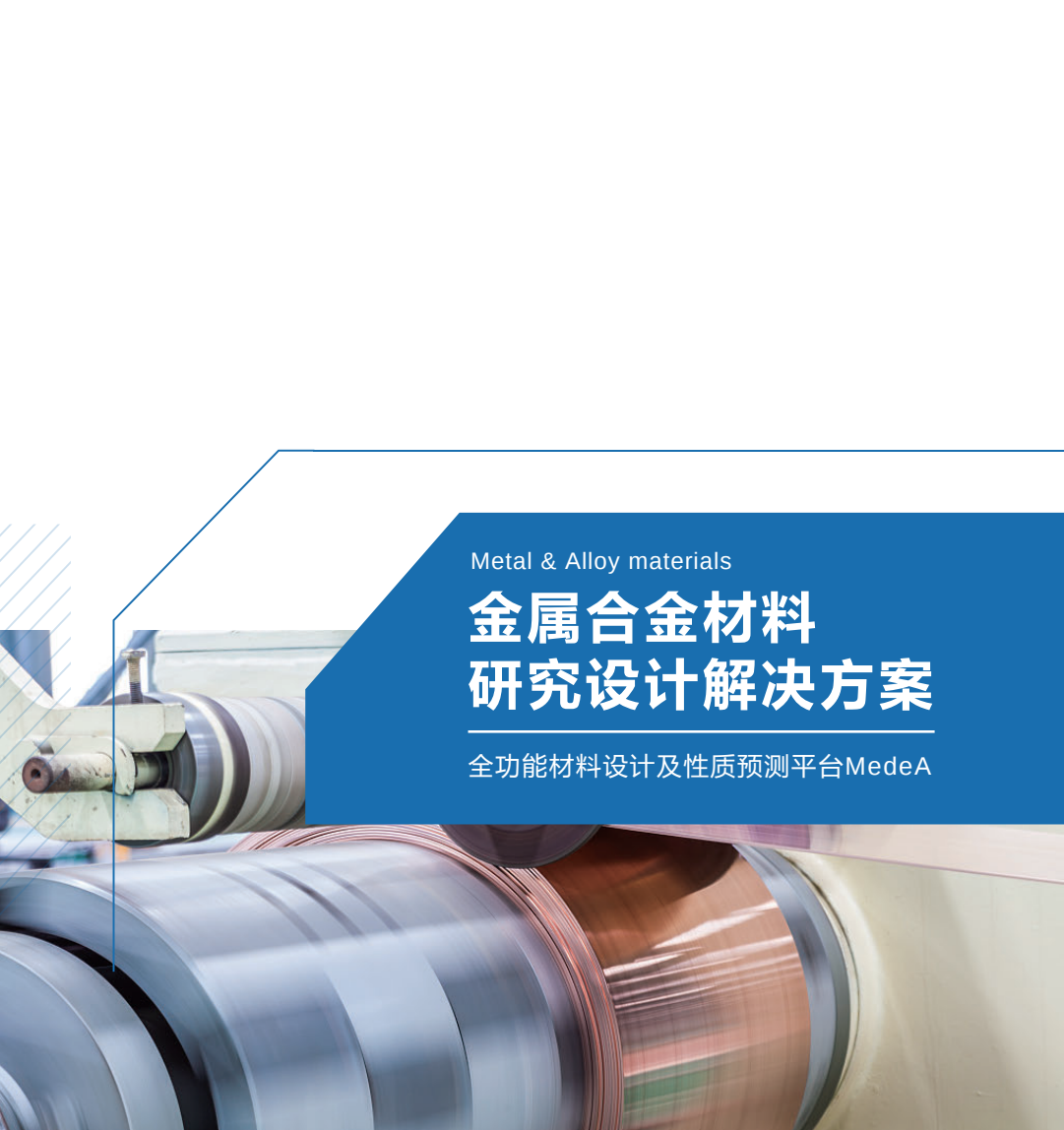




Metal & Alloy materials

金属合金材料 研究设计解决方案

全功能材料设计及性质预测平台MedeA



Metal&Alloy
materials

关于源资科技

源资信息科技（上海）有限公司于公元2008年5月在上海交通大学产学研合作的白猫科技园区内正式成立，并隶属于上海张江国家自主创新示范区的长宁分园。公司已于2015年通过ISO9001质量体系认证，于2018年荣获“高新技术企业称号”，于2020年荣获“专精特新中小企业称号”。

公司以协助国内材料、化工、医药等领域的事业发展为宗旨，以创新的理念，为材料模拟、制药研发、临床试验设计及信息和质量管理等各个领域提供连贯整合性平台解决方案。自成立之日起，公司积极组织参与材料相关领域的各种学术交流活动，以技术培训班、研讨会、在线教育、展会报告等多种方式，不断将世界范围内更新的理念，更优秀的解决方案引进中国。公司成立至今，受到了教育、学术和企业界人士的广泛肯定和赞赏。

公司于2013年9月1日正式取得Materials Design®公司VASP及MedeA软件的独家代理权。公司将为国内材料信息学这个新兴领域的科研工作者提供最大的支持和最优质的服务，帮助科研工作者们只专注于科学研究。

关于Materials Design®

Materials Design®公司由材料科学领域的知名带头人Paul Saxe博士创建于1998年，总部位于美国，并在欧洲和澳大利亚设有分公司，能够给予用户全球化的视角和快速响应的服务。

Materials Design®公司致力于将计算材料科学与实验中获得的结构数据库整合成一个全功能材料设计与性质预测平台，结合学术界中最权威的第一性原理、分子动力学、蒙特卡洛和半经验量化这几种计算方法为解决材料设计、化工生产、工业应用、基础研究等几大领域中实际存在的科学与工程问题提供了便利。目前，致力于推动计算材料科学的公司不多，Materials Design®公司作为其中之一，利用强大的数据库与计算模拟方法，帮助提升已有材料的国际竞争力，同时探索和开发新材料。Materials Design®公司旨在与全球范围内学术及工业界紧密合作，共同为人类的未来生活提供更好的材料。

The Gateway to Atom-Scale Simulation ▶▶▶

金属合金材料研究设计解决方案

MedeA是一个全功能材料设计及性质预测平台软件,其包含数据库、建模工具、多尺度计算引擎、多种理化性质预测工具等模块。



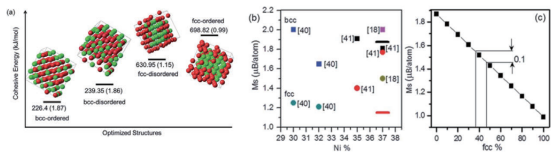
黑色金属、有色金属
稀土金属、轻金属
特种金属材料

金属合金、
掺杂缺陷、
金属纳米颗粒、
非晶态金属、
金属复合材料

金属铸造、金属加工
金属腐蚀、金属磁性
金属催化

MedeA在金属合金材料中的应用案例：铁合金

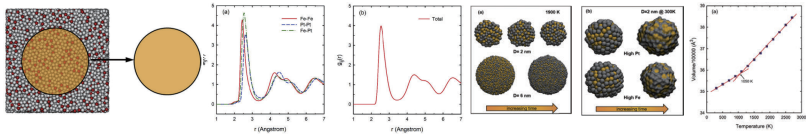
◎ FeNi纳米体系磁性对形状的依赖研究



MedeA VASP： 对FeNi合金bcc和fcc晶胞的有序和无序结构进行优化，得到fcc和bcc有序结构稳定构型为 (Fe₁₁Ni₇)×6、(Fe₅Ni₃)×16；无序结构的稳定构型为Fe₆₇Ni₄₇及Fe₇₉Ni₄₉。接着计算稳定结构的结合能和磁矩，结果表明对于bcc，有序结构较易形成；对于fcc，无序结构较易形成。

*参考文献：Nafiseh Moghimi, et al. J. Mater. Chem. C, 2014, 2, 6370-6375.

◎ 非晶FePt纳米合金的尺寸稳定性和表面能



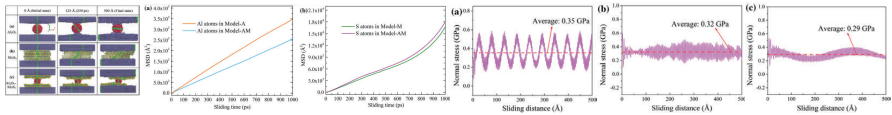
MedeA Environment： 创建FePt的合金模型。

MedeA LAMMPS： 对合金结构进行分子动力学模拟得到平衡结构。在不同温度下作平衡模拟并计算了体积-温度曲线，推出玻璃化温度T_g=1050K，与实验值相近。

MedeA LAMMPS + MedeA Analysis： 计算了不同温度下Fe-Fe、Fe-Pt与Pt-Pt原子的对共轭关联函数，表明合金在退火至室温下，依然存在中程序与近程序结构。

*参考文献：M. Vedat Akdeniz, et al. Journal of Alloys and Compounds. 788(2019):787-798.

◎ 纳米Al₂O₃与MoS₂在Fe表面间的协调润滑效应



MedeA Environment： 创建Al₂O₃和MoS₂的纳米粒，并与Fe表面结合创建界面模型。

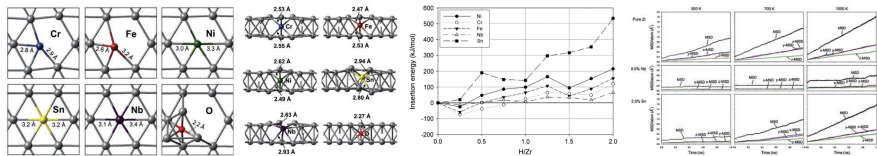
MedeA LAMMPS： 将体系在NVT系综下作分子动力学模拟，并计算界面摩擦力以及刚性层上沿z方向的正应力随滑动距离的变化图。结果表明Al₂O₃纳米粒具有很高的硬度，在压力下很容易嵌入较软的Fe表面，从而增大摩擦力。

MedeA LAMMPS + MedeA Diffusion： 计算了S与Al原子的均方位移MSD，发现S的扩散系数高于Al原子，表明二硫化钼具有更高的化学活性。二硫化钼与铁板接触区域的摩擦热积累显著促进了各种原子的扩散。

*参考文献：He J, et al. Journal of Materials Science, 2021.

MedeA在金属合金材料中的应用案例：锆合金、镍合金

● 锆合金中不同掺杂元素及其氢化的影响

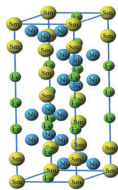


MedeA VASP：计算多种元素（Cr、Fe、Ni、Sn、Nb、O）以取代掺杂和间隙掺杂两种形式掺杂到α-Zr后，经过优化得到最稳定的平衡结构，考察结构稳定性并计算体系总能。

MedeA LAMMPS + MedeA Diffusion：预测不同温度下纯α-Zr及掺杂不同元素后α-Zr的扩散行为。

*参考文献：M. Christensen, et al. Journal of Nuclear Materials, 2014, 445(1): 241-250.

● 硬磁材料SmNi2Fe结构、电子性质及磁性DFT研究



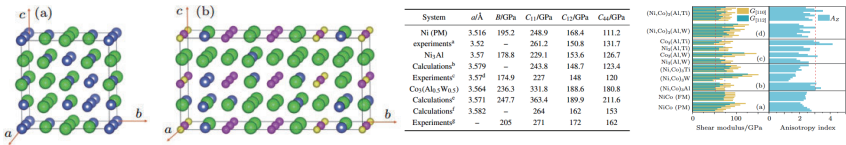
Compound	Ref.	<i>a</i> (Å)	<i>c</i> (Å)	<i>c/a</i>	<i>V</i> (Å ³)	ρ (g/cm ³)	ΔH_f (eV/f.u.)	<i>z</i> _{Sm}	<i>z</i> _{FeNi}	<i>z</i> _{FeNi}
SmNi ₂ Fe	Present-GGA	5.108	24.381	4.77	550.99	8.777	−1.526	0.1389	0.3329	0.0851
	Present-GGA + U	5.175	24.052	4.65	557.80	8.670	0.905	0.1376	0.3314	0.0845
	[22]	5.110	24.829	4.86	546.88	—	—	0.1411	0.3326	0.0794

Compound	Ref.	<i>M_f</i> (μ _B)	<i>M</i> _{Sm²⁺} ^{−1} (μ _B)	<i>M</i> _{Sm²⁺} (μ _B)	<i>M</i> _{Ni} (μ _B)	<i>M</i> _{Fe} ^{−1} (μ _B)	<i>M</i> _{Fe-2} (μ _B)
SmNi ₂ Fe	Present-GGA	8.628	−0.183	−0.134	0.370	2.560	2.351
	Present-GGA + U	9.886	−0.196	−0.197	0.369	3.031	2.985

MedeA VASP：计算分析SmNi2Fe结构、电子性质及磁性性质，SmNi2Fe晶格参数、平衡晶格体积和Wyckoff position与实验结果一致。通过形成焓可知，SmNi2Fe热力学稳定；通过电子和磁性性质分析，可知SmNi2Fe是硬磁性材料。

*参考文献：S. Akbudak, et al. J. Supercond. Nov. Magn. 32(2019), 3901-3905.

● 成分对镍基高温合金弹性性质影响



MedeA SQS：创建NiCo随机占位合金结构。

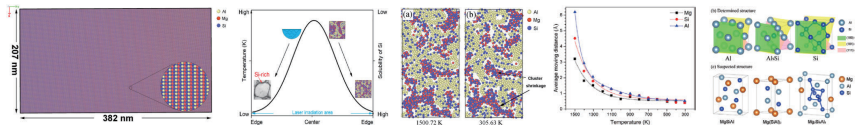
MedeA VASP：计算NiCo合金总能及电子性质，考察结构稳定性。

MedeA VASP + MedeA MT：预测不同NiCo合金力学性质，考察结构稳定性。

*参考文献：Weijie Li, et al. Chin. Phys. B Vol. 29, No. 2 (2020) 026102.

MedeA在金属合金材料中的应用案例：铝硅系合金

◉ SLM制备AlSi10Mg合金过程中硅诱导偏析的计算研究



MedeA Environment：创建AlSi10Mg的合金模型。

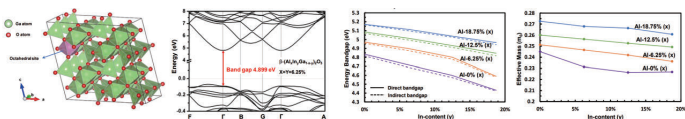
MedeA LAMMPS：采用NPT系统对合金结构进行分子动力学模拟。研究发现低温下，Si原子和Mg原子都大量地溶解在Al基体中，高温下Si偏析形成硅富集相。

MedeA LAMMPS + MedeA Diffusion：计算不同温度下固溶体中Mg、Si、Al的均方位移，淬火过程中，随着温度的降低，原子的扩散能力显著降低。

MedeA VASP：计算Al-Si-Mg固溶体的表面能与功函，Mg原子的加入一定程度上能降低表面功函与表面能。

*参考文献：Ji, Y, et al. Journal of Materials Science & Technology. 2020.6.

◉ 用于紫外线光电探测器的单斜 (Al_xIn_yGa_{1-x-y})₂O₃研究



MedeA-VASP：优化Al和In含量为0%至18.75%的β-Ga₂O₃结构，研究β-(Al_xIn_yGa_{1-x-y})₂O₃合金带隙与Al/In含量的关系。合金带隙对应波长在240-280nm区域，在实现晶格匹配的深紫外光电探测器拥有巨大应用潜力。

MedeA-Electronics：计算不同方向上合金电子的平均有效质量，研究表明Al和In原子能显著调节β-Ga₂O₃的电子有效质量。对于探索紫外光电探测器设备的灵敏度具有重要意义。

*参考文献：Xiaoli Liu and Chee-Keong Tan, 2019 IEEE Photonics Conference (IPC).

MedeA在金属合金材料中的应用案例：稀土金属

◉ 稀土金属独居石LnPO₄ (Ln=La, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd) 掺Am结构性质、缺陷稳定性研究

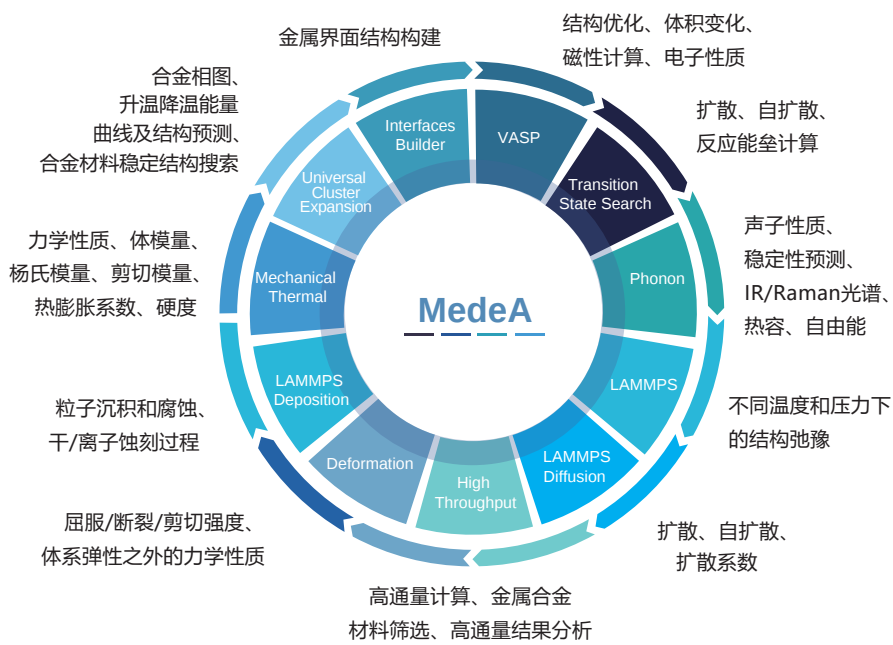


MedeA VASP：计算Am掺LnPO₄(Ln=La, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd) 独居石结构、缺陷形成能及电子性质。独居石中内壳Am 5f与O 2p轨道的化学键合；Ln-monazite中Am-O键从La到Gd逐渐缩短，导致[AmO₉]多面体沿镧系元素收缩；掺Am的LnPO₄独居石热力学稳定，且所有Ln_{1-x}Am_xPO₄固溶体在285K上均能保持稳定。

*参考文献：X. Zhao et al. Journal of Alloys and Compounds 806 (2019) 113-119.

金属合金材料研究设计解决方案

- ◇ 材料种类：黑色（磁性）金属、稀有金属、过渡金属、有色金属
- ◇ 模型种类：块体、表面、掺杂、缺陷、纳米结构、界面
- ◇ 性质预测：结构、热力学、力学、扩散、自扩散、磁性、电子性质、相图
- ◇ 行为模拟：溅射、沉积、断裂、拉伸、扩散



源资科技-VASP&MedeA在中国的官方代理商
中国地区只授权一家，可提供正规授权函
关注VASP & MedeA官方公众号
回复“试用”，填写表单，申请MedeA试用
联系邮箱support@tri-ibitech.com



进入源资科技-B站视频空间，
观看所有教学视频！
方法1：登录哔哩哔哩网站或APP，搜索源资科技；
方法2：扫描左侧二维码直接观看。

金属合金材料研究设计解决方案

材料种类	模型种类	性质预测	行为模拟
黑色金属、 稀有金属、 过渡金属、 有色金属	块体、表面、 掺杂、缺陷、 纳米结构、 界面、异质结	结构、热力学、 力学、扩散、 自扩散、磁性、 电子性质、相图	溅射、沉积、 断裂、拉伸、 扩散



源资信息科技(上海)有限公司
电话: +86-21-32504385
网址: www.tri-ibiotech.com
邮箱: support@tri-ibiotech.com

上海总公司
地址: 上海市长宁区天山路18号701室
重庆办事处
地址: 重庆市渝中区石油路大坪时代天街
B馆3栋2803

北京分公司
地址: 北京市顺义区安泰大街融慧园15-3
南京维保中心
地址: 南京市玄武区珠江路699号
东鼎大厦C座401

