

<<现代电子理论在材料设计中的应用>>

图书基本信息

书名：<<现代电子理论在材料设计中的应用>>

13位ISBN编号：9787030316738

10位ISBN编号：7030316738

出版时间：2011-5

出版时间：科学出版社

作者：张国荣，刘贵立 著

页数：193

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

<<现代电子理论在材料设计中的应用>>

内容概要

本书是一本关于现代电子理论在材料强化、腐蚀钝化及氧化领域应用成果的著作。书中融有多年来作者及同事们的科研成果及国内外研究成果与新发展。本书的主要内容包括：现代电子理论基础包括密度泛函理论和连分数方法的介绍；钢铁材料强化（包括超细化）、镁合金高温强化机理的电子理论研究；镁合金、钛合金及奥氏体不锈钢晶间腐蚀、应力腐蚀、氢脆、在水溶液中腐蚀钝化及氯离子影响机理的电子理论研究；镁合金氧化及稀土阻燃机理、多元合金化对-TiAl合金氧化影响机理、NiCrAl,FeCrAl合金氧化及其影响机理的电子理论研究。

书籍目录

前言

第1章 现代电子理论基础

- 1.1 导论
- 1.2 能带理论
 - 1.2.1 自由电子近似
 - 1.2.2 近自由电子近似
 - 1.2.3 三维能带理论
- 1.3 密度泛函理论
 - 1.3.1 量子多体理论
 - 1.3.2 霍恩伯格—科恩定理
 - 1.3.3 密度泛函的基本思想
 - 1.3.4 科恩—沈方程
 - 1.3.5 交换关联泛函
 - 1.3.6 基于密度泛函理论的第一性原理解决方案
 - 1.3.7 CASTEP软件简介
- 1.4 实空间连分数方法
 - 1.4.1 连分数方法的数学基础
 - 1.4.2 连分数方法在结构材料中的应用
 - 1.4.3 体系总结构能计算

参考文献

第2章 金属材料强化机理的电子理论研究

- 2.1 金属材料强化原理
 - 2.1.1 强化的理论基础
 - 2.1.2 金属强化途径
 - 2.1.3 位错与强化
 - 2.1.4 材料高温蠕变及影响因素
- 2.2 钢铁材料中的位错行为与钢的强化机理电子理论研究
 - 2.2.1 钢铁材料铁素体相中刃位错的建立
 - 2.2.2 结果分析与讨论
 - 2.2.3 本节结论

.....

参考文献

章节摘录

点蚀可分为两个阶段，即蚀孔成核和蚀孔生长。

蚀孔成核的原因目前有两种学说，即钝化膜破坏理论和吸附理论。

钝化膜破坏理论认为小孔的发生是当腐蚀阴离子在材料钝化膜上吸附后，由于阴离子（氯离子）半径小而穿过钝化膜，阴离子进入膜内后污染了氧化膜，产生了强烈的感应离子导电，于是此膜在一定点上变得能够维持高的电流密度，并能使阳离子杂乱移动而活跃起来，当膜—溶液界面的电场达到某一临界值时，就发生点蚀。

吸附理论认为点蚀的发生是由于氯离子和氧竞争吸附造成的。

当金属表面上氧的吸附被氯离子代替时，点蚀就发生。

蚀孔生长的模型也有很多学说，目前比较公认的是蚀孔内发生的自催化过程。

点蚀一旦发生，蚀孔内的金属发生溶解，如果是在含氯离子水溶液中，则阴极反应为吸氧反应，孔内氧浓度下降，而蚀孔外富氧形成氧浓差电池。

孔内金属离子不断增加，为保持电中性，蚀孔外的阴离子向孔内迁移，孔内氯离子浓度升高。

孔内金属离子浓度升高并发生水解，使孔内溶液氢离子浓度升高，pH降低。

孔内酸化，使蚀孔内金属处于HCl介质中，即处于活化溶解状态；而蚀孔外溶液仍然是富氧，介质维持中性，因此表面膜维持钝态，从而构成了活化（孔内）—钝化（孔外）腐蚀电池，促使蚀孔内金属不断溶解，蚀孔外表面发生氧的还原。

这样使点蚀以自催化的过程发展下去，从而促进腐蚀破坏的迅速发展。

点蚀的影响包括环境因素和冶金因素。

冶金因素主要是合金元素的影响，比如提高不锈钢耐点蚀性最有效的元素是铬、钼、氮、镍。

环境因素指材料所处的介质特性。

某些材料易发生点蚀的介质是特定的，如不锈钢易在含卤族元素阴离子中发生。

另外介质的浓度对点蚀有影响，一般认为只有当卤族离子达到一定的浓度才发生点蚀。

此外，温度升高，点蚀电位降低；使点蚀电位上升。

2.晶间腐蚀 常用金属和合金都是由多晶体组成，有大量的晶界和相界。

.....

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>