

<<材料相变过程微观组织模拟>>

图书基本信息

书名：<<材料相变过程微观组织模拟>>

13位ISBN编号：9787118065602

10位ISBN编号：7118065609

出版时间：2010-3

出版时间：国防工业出版社

作者：赵宇宏

页数：172

字数：210000

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>

<<材料相变过程微观组织模拟>>

前言

金属材料的化学成分不同，其性能也不同，但对于同一种成分的材料，通过不同的加工处理工艺，改变材料的内部结构和组织状态，也可使其性能发生极大的变化。

因此，对金属及合金内部微结构进行研究，是改善和发展新型材料的重要途径。

所谓微结构，是指所有热力学非平衡态的晶格缺陷空间分布的集合；其空间尺寸可由零点几纳米到微米量级，所对应的时间尺度可以从数秒（如非平衡态的杂质原子）到数年（如腐蚀、蠕变和疲劳等过程）。

单从空间尺寸角度，不同层次的微结构模型可大致分为纳观、微观、介观和宏观等系统。

由于微结构组分在空间和时间上分布范围很大及其内部的复杂性，要从物理上量化地预测其演化及性质之间的关系，采用各种模型和模拟方法非常必要。

尤其是对不能给出严格解析解或不易进行实验研究的问题，应用模型和模拟更为重要。

计算材料学是一门涉及材料、物理、计算机、数学、化学等，正在快速发展的新兴学科，主要包括两方面的内容：一方面是计算模拟，即从实验数据出发，通过建立数学模型及数值计算，模拟实际过程；另一方面是材料的计算机设计，即直接通过理论模型和计算，预测或设计材料结构与性能。

前者使材料研究不仅仅停留在实验结果和定性的讨论上，而是使特定材料体系的实验结果上升为一般的、定量的理论；后者则使材料的研究与开发更具方向性、前瞻性，有助于原始性创新，可以大大提高研究效率。

因此，计算材料学是连接材料学理论与实验的桥梁。

高性能、高保真、高效率、多学科及多尺度是模拟仿真技术的努力目标，而微观组织模拟（从毫米、微米到纳米尺度）则是近年来研究的新热点。

<<材料相变过程微观组织模拟>>

内容概要

本书主要介绍了采用相场法对金属材料沉淀相变和凝固过程中微观组织的演化进行模拟的理论模型和实际算例。

全书共分6章，主要内容包括绪论，相场法在合金沉淀过程中的理论模型及应用，相场法在凝固过程中的理论模型及应用。

本书既可作为材料科学专业研究生的教材，也可作为材料专业科技工作者的参考书。

<<材料相变过程微观组织模拟>>

书籍目录

第1章 绪论	1.1 引言	1.2 沉淀动力学理论	1.2.1 非匀相转变	1.2.2 匀相转变	1.2.3 统一理论	1.2.4 沉淀相形貌	1.3 沉淀动力学计算机模拟	1.3.1 材料微结构模拟尺度及方法概述	1.3.2 蒙特卡洛(MC)方法及对沉淀过程的模拟	1.3.3 分子动力学方法	1.3.4 相场法及对沉淀过程的模拟	1.3.5 二元Ni-Al合金沉淀过程研究进展	1.3.6 三元合金沉淀过程模拟研究进展	1.3.7 共格弹性应变能对沉淀过程的影响模拟研究现状	1.4 凝固动力学相场法模拟	1.4.1 熔体凝固过程相场模型的提出	1.4.2 朗道理论和金兹堡—朗道理论	1.4.3 凝固界面相场模型	第2章 合金沉淀过程动力学模型	2.1 引言	2.2 模型的基本假设	2.3 二元体系动力学模型	2.3.1 微观相场方程	2.3.2 微观Langevin方程	2.3.3 傅里叶空间中的微观Langevin方程	2.3.4 应用到P.c.c晶格	2.3.5 三维P.c.c晶格的二维投影动力学	2.3.6 热起伏的产生	2.3.7 微扩散方程与连续扩散方程的关系	2.4 三元体系动力学模型	2.4.1 三元体系微观相场扩散方程	2.4.2 傅里叶空间中的微观Langevin方程	2.4.3 平均场自由能	2.4.4 四近邻原子间相互作用近似	2.4.5 投影后的最终动力学方程	2.5 模型的特点	2.6 研究对象二元Ni-Al合金	2.7 研究对象三元Ni ₇₅ Al _x V _{25-x} 合金	2.8 编程思路	2.9 本章小结	第3章 二元Ni-Al合金 '相早期沉淀机制	3.1 低浓度Ni-Al合金 '相早期沉淀机制	3.1.1 引言	3.1.2 沉淀相 '(Ni ₃ Al)的有序结构	3.1.3 模拟结果	3.1.4 分析与讨论	3.2 高浓度Ni-Al合金 '相早期沉淀机制	3.2.1 引言	3.2.2 模拟结果	3.2.3 分析与讨论	3.3 中间浓度Ni-Al合金 '相早期沉淀机制	3.3.1 引言	3.3.2 模拟结果	3.3.3 分析与讨论	3.4 本章小结	第4章 三元Ni ₇₅ Al _{2.5} V _{22.5} 合金沉淀机制模拟	4.1 区Ni ₇₅ Al _{2.5} V _{22.5} 合金沉淀机制模拟	4.1.1 引言	4.1.2 模拟结果	4.1.3 分析与讨论	4.2 区Ni ₇₅ Al _{2.5} V _{22.5} 合金沉淀机制模拟	4.2.1 引言	4.2.2 模拟结果	4.2.3 分析与讨论	4.3 区Ni ₇₅ Al _{2.5} V _{22.5} 合金沉淀机制模拟	4.3.1 引言	4.3.2 模拟结果	4.3.3 分析与讨论	4.4 本章小结	第5章 共格弹性应变能对沉淀相形貌的影响	5.1 引言	5.2 微观弹性力学理论	5.3 微扩散方程和微观弹性力学理论的耦合	5.4 无量纲形式的动力学方程	5.5 研究对象模型合金简介	5.6 模拟结果	5.6.1 模拟点“a”(C ₀ =12at.%, T [*] =0.12)合金的沉淀过程	5.6.2 模拟点“b”(C ₀ =14at.%, T [*] =0.08)合金的沉淀过程	5.6.3 模拟点“c”(C ₀ =50at.%, T [*] =0.08)合金的沉淀过程	5.7 模拟结果与实验结果的比较	5.8 本章小结	第6章 凝固过程枝晶生长相场法模拟	6.1 概述	6.2 相场法数值模型	6.2.1 界面模型	6.2.2 相场模型	6.2.3 纯物质相场模型	6.2.4 单相二元合金的相场模型	6.2.5 各向异性模型	6.2.6 噪声	6.3 相场模型的数值计算	6.3.1 初始条件和边界条件	6.3.2 空间离散	6.3.3 时间离散	6.3.4 差分方程的稳定性条件	6.3.5 程序流程图	6.4 铝合金枝晶生长模拟结果和分析	6.4.1 不加噪声的枝晶形貌	6.4.2 加噪声的枝晶形貌	6.4.3 初始晶核半径对枝晶生长的影响	6.4.4 空间步长对枝晶尖端半径和枝晶尖端生长速度的影响	6.4.5 各向异性系数对枝晶生长的影响	6.4.6 过冷度对枝晶生长的影响	6.5 宏观微观模拟相耦合方法的研究	6.5.1 宏微观耦合的插值方法	6.5.2 宏微观耦合模拟计算数值稳定性	6.6 本章小结	参考文献
--------	--------	-------------	-------------	------------	------------	-------------	----------------	----------------------	---------------------------	---------------	--------------------	-------------------------	----------------------	-----------------------------	----------------	---------------------	---------------------	----------------	-----------------	--------	-------------	---------------	--------------	--------------------	---------------------------	------------------	-------------------------	--------------	-----------------------	---------------	--------------------	---------------------------	--------------	--------------------	-------------------	-----------	-------------------	---	----------	----------	------------------------	-------------------------	----------	--------------------------------------	------------	-------------	-------------------------	----------	------------	-------------	--------------------------	----------	------------	-------------	----------	---	--	----------	------------	-------------	--	----------	------------	-------------	--	----------	------------	-------------	----------	----------------------	--------	--------------	-----------------------	-----------------	----------------	----------	---	---	---	------------------	----------	-------------------	--------	-------------	------------	------------	---------------	-------------------	--------------	----------	---------------	-----------------	------------	------------	------------------	-------------	--------------------	-----------------	----------------	----------------------	-------------------------------	----------------------	-------------------	--------------------	------------------	----------------------	----------	------

<<材料相变过程微观组织模拟>>

章节摘录

插图：1.1引言随着计算机技术的发展，采用数值模拟方法对真实材料系统进行模拟“实验”，提供模拟结果，指导新材料研究，是材料设计的有效途径之一。

在许多难以进行或根本无法进行实验的情况下，模拟则尤为重要。

1.2 沉淀动力学理论沉淀是最重要的固态相变之一，合金的重要性质，如强度、韧性、抗蠕变、抗磨损、磁性和超导性能等，很大程度上取决于沉淀相，因此，揭示早期沉淀机制，进而精确控制其显微组织，对材料科学有重要意义。

19世纪，吉布斯将导致相变过程的涨落区分为两类：第一类是程度甚大而空间范围甚小的涨落；第二类是程度甚小而空间范围甚大的涨落。

第一类涨落导致通过形核生长的过程实现非匀相转变。

非匀相转变动力学已取得比较完整的认识，各阶段理论已初具框架；第二类涨落导致失稳分解，即匀相转变，其动力学直到20世纪50年代才从理论上取得重要突破，目前还有待于进一步发展。

1.2.1 非匀相转变1.经典成核（明锐界面模型）假设均匀固溶体急冷入混溶隙内的亚稳区，然后在此区足以使溶质扩散的温度时效，一段时间后基体中将形成 i 个原子（个体）的微集团。

经典形核理论将溶质涨落视为分布在基体中的微粒，构成平衡沉淀相的一部分。

在这种微粒模型中，假定基体相和沉淀相的界面为明锐的，这一近似减少了描述集团的独立变量数目（虽然形核过程中这些变量事实上或许会发生变化，例如，溶质浓度、集团内原子分布、集团形状和界面两侧的成分变化等）。

<<材料相变过程微观组织模拟>>

编辑推荐

《材料相变过程微观组织模拟》是由国防工业出版社出版的。

<<材料相变过程微观组织模拟>>

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>