

<<冶金熔体结构和性质的计算机模拟计算>>

图书基本信息

书名：<<冶金熔体结构和性质的计算机模拟计算>>

13位ISBN编号：9787502439064

10位ISBN编号：7502439064

出版时间：2006-3

出版时间：冶金工业出版社

作者：谢刚

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>

<<冶金熔体结构和性质的计算机模拟计算>>

内容概要

本书共有8章，主要内容包括绪论、计算机模拟原理和方法、碱金属硅酸盐熔体结构研究、钙硅酸盐和钙铝硅酸年轻熔体结构的MD计算、硼酸盐溶体结构的MD计算和拉曼光谱、冰晶石-氧化铝体系熔融盐结构的分子动力学计算、碳酸盐和亚硝酸盐的拉曼光谱研究以及稀土金属卤化物熔体结构的MD计算。

本书适合从事冶金熔体结构和性质的计算机模拟研究人员及科研院所高校相关专业人员阅读参考。

<<冶金熔体结构和性质的计算机模拟计算>>

书籍目录

1 绪论 1.1 引言 1.2 冶金熔体计算机模拟研究的发展 2 计算机模拟原理和方法 2.1 引言 2.2 离子问势 2.3 边界条件 2.4 Monte Carlo(MC)模拟计算方法 2.5 分子动力学(MD)模拟计算方法 2.6 热力学性质和结构的计算结果分析 2.7 高温拉曼光谱 3 碱金属硅酸盐熔体结构研究 3.1 引言 3.2 $(\text{Na}_2\text{O})_x(\text{SiO}_2)_{1-x}$ 熔体结构的分子动力学计算 3.3 $\text{Na}_2\text{Si}_2\text{O}_3\text{—CaF}_2$ 熔体(MI)计算及拉曼光谱 3.4 $\text{K}_2\text{O}_2\text{SiO}_2$ 和 $\text{Li}_2\text{O}_2\text{SiO}_2$ 熔体结构的MD计算 4 钙硅酸盐和钙铝硅酸盐熔体结构的MD计算 4.1 $(\text{CaO})_x(\text{SiO}_2)_{1-x}$ 熔体结构的模拟计算 4.2 $\text{CaO—Al}_2\text{O}_3\text{—SiO}_2$ 熔体结构的MD计算 5 硼酸盐熔体结构的MD计算和拉曼光谱 5.1 引言 5.2 偏硼酸锂和二硼酸锂熔体结构的拉曼光谱和MD计算 6 冰晶石—氧化铝体系熔融盐结构的分子动力学计算 6.1 引言 6.2 熔融 $(\text{NaF})_x(\text{AlF}_3)_{1-x}$ 体系的MD计算 6.3 氧化铝的冰晶石氧化铝混合熔体的结构计算 7 碳酸盐和亚硝酸盐的拉曼光谱研究 7.1 固体和熔融碱金属碳酸盐的拉曼光谱研究 7.2 固体和熔融亚硝酸钠的Raman光谱研究 8 稀土金属卤化物熔体结构的MD计算 8.1 单一稀土氯化物熔体结构的MD计算 8.2 KCl—CaCl_2 熔体结构的MD计算 8.3 $\text{RECl}_3\text{—KCl—NaCl}$ 系熔体结构的MD计算 8.4 $\text{LaF}_3\text{—LiF}$ 熔体结构的MD模拟计算参考文献

<<冶金熔体结构和性质的计算机模拟计算>>

编辑推荐

本书内容共有8章，主要包括绪论、计算机模拟原理和方法、碱金属硅酸盐熔体结构研究、钙硅酸盐和钙铝硅酸盐熔体结构的MD计算、硼酸盐熔体结构的MD计算和拉曼光谱、冰晶石-氧化铝体系熔融盐结构的分子动力学计算、碳酸盐和亚硝酸盐的拉曼光谱研究以及稀土金属卤化物熔体结构的MD计算。

本书适合从事冶金熔体结构和性质的计算机模拟研究人员及科研院所高校相关专业人员阅读参考。

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>