第一图书网, tushu007.com

<<计算材料学基础>>

图书基本信息

书名：<<计算材料学基础>>

13位ISBN编号：9787810777889

10位ISBN编号：7810777882

出版时间：2007-6

出版时间：北京航天航空大学出版社

作者：张跃

页数：240

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

内容概要

本书共9章，主要介绍计算材料学中最具代表性的四种计算方法，包括用于电子和原子尺度材料计算的量子力学第一性原理方法和分子动力学方法，用于微、介观尺度的Monte Carlo方法以及宏观尺度的有限元计算方法。
本书的特点是根据材料专业学生的知识结构和计算材料学自身的特点，重点介绍各方法的基础理论及其在材料研究中的应用，是计算材料学方面的一本较系统、完整的教材。
本书可作为高等学校材料科学与工程专业本科生和研究生的教材，也可作为材料科学与工程领域的大专院校教师和科技工作者的参考书。

<<计算材料学基础>>

书籍目录

第1章　量子力学基础11.1 波函数与薛定谔方程11.1.1 波粒二象性11.1.2 波函数及其统计诠释21.1.3 态叠加原理41.1.4 薛定谔方程——量子力学的基本方程41.1.5 定态薛定谔方程41.2 算符与力学量51.2.1 算符51.2.2 力学量的表示71.2.3 力学量的取值81.3 电子在库仑场中的运动101.3.1 角动量算符101.3.2 电子在库仑场中的运动111.3.3 氢原子131.4 自旋与全同粒子141.4.1 自旋141.4.2 全同粒子171.5 微扰理论与变分原理181.5.1 原子单位制181.5.2 Born?Oppenheimer近似——绝热近似191.5.3 微扰理论201.5.4 变分原理221.6 密度泛函理论261.6.1 Hohenberg?Kohn定理271.6.2 Kohn?Sham方程28本章小结29习题30参考文献30第2章　量子化学计算322.1 多电子原子的自洽场计算322.1.1 原子中电子态的描述322.1.2 闭壳层组态的Hartree?Fock方程332.1.3 开壳层组态的Hartree?Fock 方法352.2 分子轨道理论362.2.1 概述362.2.2 闭壳层组态的Hartree?Fock?Roothaan方程382.2.3 开壳层电子组态的Hartree?Fock?Roothaan方程402.3 分子轨道从头计算法422.3.1 基组的选择422.3.2 电子相关482.3.3 分子自洽场计算过程502.4 量子化学计算的应用522.4.1 单点能计算522.4.2 几何优化552.4.3 频率计算56本章小结57习题57参考文献57第3章　能带计算593.1 Bloch定理与能带结构593.1.1 Bloch定理593.1.2 能带的对称性603.1.3 能态密度和费米能级613.2 能带计算方法623.2.1 平面波方法623.2.2 紧束缚近似方法643.2.3 正交化平面波方法653.2.4 赝势方法673.3 能带计算的过程与晶体物理性质的计算703.3.1 能带计算的过程703.3.2 晶体的总能量713.3.3 几何优化743.3.4 能带结构743.3.5 能态密度753.3.6 布居分析773.3.7 弹性常数783.3.8 热力学性质793.3.9 光学性质79本章小结80习题81参考文献81第4章　分子动力学基础834.1 引言834.1.1 什么是分子动力学834.1.2 分子动力学发展历史834.2 分子动力学的基本思想844.2.1 经典力学定律844.2.2 分子动力学方法工作框图854.2.3 分子动力学的适用范围864.3 分子动力学的主要技术概要874.3.1 分子动力学运行流程图874.3.2 初始体系的设置884.3.3 时间步长和势函数894.3.4 力的计算方法904.3.5 算法的选取924.4 分子运动方程的数值求解934.4.1 Verlet算法934.4.2 Leap?frog算法944.4.3 速度Verlet算法944.4.4 预测校正算法954.5 边界条件与初值954.5.1 边界条件954.5.2 初值问题974.6 物质的势函数984.6.1 势函数的简介和分类984.6.2 对势1004.6.3 适应金属、合金的多体势——EAM，MEAM1014.6.4 共价晶体的作用势1034.6.5 有机分子中的作用势(力场)［33］1054.6.6 分子间作用势1084.6.7 第一性原理原子间相互作用势1104.7 系综原理［33，41］1114.7.1 微正则系综1124.7.2 正则系综（NVT）1134.7.3 等温等压系综1144.7.4 等压等焓系综（NPH）116本章小结116习题117参考文献117第5章　分子动力学性能分析及其应用1195.1 平均值1195.2 分子动力学静态性能分析1205.2.1 温度T1205.2.2 能量1205.2.3 压力P1215.2.4 径向分布函数1215.2.5 静态结构因子1225.2.6 热力学性质1225.3 分子动力学动态性能分析1235.3.1 关联函数1235.3.2 输运性质1255.4 聚合物与金属氧化物表面的相互作用1275.5 气体在聚合物中的扩散系数［12］1285.6 Cu的纳米线、纳米薄膜、单晶块材的拉伸力学性能的模拟1295.7 非晶态形成过程的模拟［14］1305.8 第一性原理分子动力学简介1325.8.1 引言1325.8.2 第一性原理多原子体系动力学求解方法(Car?Parrinello方法)133本章小节135习题135参考文献135第6章　Monte Carlo方法1376.1 Monte Carlo方法基础1376.1.1 引言1376.1.2 Monte Carlo方法及其历史1376.1.3 Monte Carlo方法的基本思想1386.1.4 Monte Carlo方法的收敛性和基本特点1396.2 随机数的产生1406.2.1 随机数与伪随机数1406.2.2 伪随机数的产生方法1416.2.3 伪随机数的统计检验1416.3 随机变量抽样1426.3.1 随机变量1426.3.2 随机变量的直接抽样法1426.3.3 随机变量的舍选抽样法1446.3.4 随机抽样在MATLAB中的实现1446.4 确定性问题的Monte Carlo方法求解1466.4.1 蒲丰试验1466.4.2 定积分计算1476.4.3 椭圆偏微分方程的求解1496.5 随机性问题的Monte Carlo模拟1516.5.1 随机行走(random walk)模拟1516.5.2 Markov链1526.5.3 Metropolis Monte Carlo法1536.5.4 Monte Carlo方法的能量模型1556.5.5 格子类型157本章小结157习题158参考文献158第7章　Monte Carlo方法在材料科学中的应用1607.1 Monte Carlo方法与统计物理1607.1.1 宏观量的统计性质1607.1.2 统计平均与归一化分布1617.1.3 近独立粒子系统的统计分布1617.1.4 正则系综的统计分布1637.1.5 Monte Carlo方法在统计物理中的应用1647.2 Monte Carlo方法在高分子材料研究中的应用1667.2.1 高分子链构象的Monte Carlo模拟1667.2.2 高分子链动力学的Monte Carlo模拟1687.2.3 高分子玻璃转变的Monte Carlo模拟1747.3 Monte Carlo方法在无机材料研究中的应用1767.3.1 表面偏析的模拟1767.3.2 多晶材料的晶粒生长的模拟1807.3.3 薄膜沉积动力学的模拟183本章小结186习题186参考文献187第8章　有限元方法基础1918.1 引言1918.1.1 有限元方法的用途1918.1.2 有限元方法简介［1］1938.1.3 有限元法的工程应用［1］1948.1.4 有限元分析

的软件平台——ANSYS程序简介［2］1968.2 材料的静力学分析基础［3－6］1978.2.1 应力状态分析1978.2.2 应变状态分析1988.2.3 应力应变关系分析2008.3 材料的动力学分析基础［3，5，7，8］2088.4 材料的热学分析基础［2，5，8］211本章小结213习题213参考文献214第9章　材料的“场”分析实例2159.1 材料的结构静力学分析［1?4］2159.1.1 结构线性静力分析步骤2159.1.2 结构线性静力分析实例2169.2 结构材料的动力学分析［1，2，5，6］2189.2.1 模态分析2199.2.2 谐响应分析2209.3 高温材料的温度场分析［1，2，5，6］2229.3.1 稳态热分析2229.3.2 稳态热分析实例2239.3.3 瞬态热分析2269.4 磁性材料的磁场分析［2，5，6］2279.4.1 2D静态磁场分析2279.4.2 2D瞬态磁场分析2289.5 材料的耦合场分析［5，6］2289.5.1 顺序耦合场分析2299.5.2 直接耦合方法2309.5.3 实例——热障涂层静态氧化失效过程的有限元模拟230本章小节233习题234参考文献235主题词索引236

第一图书网, tushu007.com

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