

<<计算材料科学>>

图书基本信息

书名：<<计算材料科学>>

13位ISBN编号：9787502565442

10位ISBN编号：7502565442

出版时间：2005-7

出版时间：化学工业出版社

作者：陈舜麟

页数：316

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>

<<计算材料科学>>

内容概要

计算材料科学是计算物理学的一个分支，涉及范围甚广。

本书则重点介绍固体材料（主要是金属材料）中微缺陷的分子动力学模拟计算和蒙特卡洛模拟计算的实用性方法和系统方面的概念。

分别从误差理论、数值计算概要、分子动力学运动方程解法、计算机模拟的粒子系统、势函数理论与模型、金属中的嵌入势模型、Monte Carlo方法及应用、计算程序设计等方面展开论述。

并配有大量程序、公式、图、表及附录。

可供从事材料科学的研究生及该专业高年级大学生和其他学习者参考。

书籍目录

第1章计算物理学和计算材料科学11?0绪论11?1计算物理学的起源与发展11?2计算物理学的特点和方法21?3计算物理学的进展51?4计算材料科学61?4?1分子动力学的发展历程71?4?2蒙特卡洛方法及其发展历程8参考文献9第2章误差理论102?1误差的基本概念102?1?1准确值, 误差限, 真值, 期望值和平均值102?1?2误差的具体类型112?1?3有效数与可靠数112?2随机误差122?2?1误差分布函数122?2?2随机误差的特点132?2?3随机误差的估算132?3误差传递公式152?3?1单变量误差的传递162?3?2多变量误差的传递162?3?3标准误差的传递公式162?3?4关于测量数列算术平均值的标准误差172?4计算机中的数值运算182?4?1整数182?4?2浮点数表示及误差182?4?3计算函数值的坏条件判别法182?4?4保证计算数值稳定的原则192?5矩阵运算中的误差问题202?5?1矩阵的条件数202?5?2线性方程组解的相对误差20参考文献22第3章数值计算概要233?1范数与谱半径233?1?1范数的定义233?1?2矩阵的谱半径243?2线性方程组的解法243?2?1矩阵求逆法243?2?2选主元的三角分解法253?3矩阵的特征值问题273?3?1矩阵折叠法求本征值283?3?2实对称矩阵的雅克比对角化变换法303?3?3特征值的敏感性333?4矩阵的镜象变换法343?4?1镜象变换法343?4?2实对称三对角矩阵的本征值363?5曲线插值法373?5?1抛物型插值法的拉格朗日公式373?5?2抛物型插值法的牛顿公式383?6最佳一致逼近393?6?1切比雪夫多项式393?6?2最佳平方逼近393?6?3最小二乘法423?6?4正交多项式逼近423?7差分和差商运算473?7?1差分算子473?7?2差商公式483?8积分运算493?8?1多项式逼近的数值积分公式493?8?2高斯数值积分法513?9迭代运算543?9?1直接迭代法543?9?2牛顿迭代法543?9?3弦截法553?10微分方程的数值解法563?10?1Numerov法563?10?2龙格?库塔法563?10?3高阶微分方程和一阶微分方程组的龙格?库塔法求解57参考文献58第4章分子动力学运动方程解法594?1理论力学原理604?1?1最小作用量原理604?1?2拉格朗日 (Lagrange) 方程614?1?3哈密顿 (Hamilton) 方程634?1?4哈密顿 (Hamilton) 量与半经典量子化计算644?2粒子与粒子系综674?2?1相互作用的多粒子系综674?2?2粒子相互作用模型的平衡统计性质——热力学性质的时间平均684?3粒子系统运动方程的数值解法694?3?1边界条件694?3?2Verlet算法704?3?3Gear算法714?4Gear预测?矫正方法714?4?1表象表示法714?4?2表象变换724?4?3预测?矫正法 (predictor?corrector) 734?5几种算法的比较764?5?1Verlet算法764?5?2跳蛙式算法774?5?3Beeman算法774?5?4比较几种算法的精度784?6复合函数算法794?6?1第一型算法804?6?2第二型算法804?7高阶综合矫正复合函数算法824?7?1第一型推广算法824?7?2第二型推广算法844?7?3第三型推广算法854?7?4第四型推广算法864?7?5第五型推广算法894?7?6更高阶预测公式92参考文献93第5章计算机模拟的粒子系综945?1微正则系综 (E, V, N) 955?1?1计算热力学量955?1?2运动方程组的建立975?1?3数值求解的具体实施985?2正则系综 (N, V, T) 1005?2?1正则系综的原理1005?2?2正则系综分子动力学算法1025?2?3正则系综与微正则系综的区别1045?3等温等压系综 (N, P, T) 1055?3?1等温扩展法1055?3?2等压扩展法1065?4体积可变的等焓等压 (H, P, N) 系综1075?4?1晶胞结构矩阵与矢量的建立1085?4?2仅有均匀恒压的情况1085?4?3系统受到外部胁强时的一般情况1095?5新恒压分子动力学模型1105?5?1分子系统的运动方程1105?5?2分子系统的守恒定律1125?5?3对称的晶胞矢量h约束下的运动方程1135?5?4受约束动力学晶胞的运动方程1155?6自由能的计算和其他系综1175?6?1巨正则系综1185?6?2Gibbs系综1195?6?3半巨系综1195?7非平衡系综动力学1205?7?1输运过程1205?7?2非平衡分子动力学模拟 (NEMD) 1205?7?3非平衡分子动力学在线性谐振子上的应用1225?7?4自扩散算法123参考文献124第6章势函数理论与模型1256?1势函数发展简介1256?1?1原子间相互作用势的发展概况1266?1?2构成分子的原子间势1276?1?3固体中的对势模型1276?1?4多体势1296?2半经验势1296?2?1长程势1296?2?2短程势1306?3经验势1316?4赝势模型1326?4?1等效势概念1336?4?2电子密度和赝密度1346?4?3离子赝势1346?5共价和离子晶体中的原子间相互作用势1356?5?1二体加三体势 (团簇势) 1366?5?2Abell势模型1376?5?3Tersoff势模型1386?5?4KD势模型1396?5?5分子间势模型1406?5?6电子气势模型1416?6紧束缚势模型和密度泛函理论1436?6?1密度泛函理论1436?6?2态密度和带能1476?6?3紧束缚近似1486?6?4能矩和二次矩1486?6?5过渡金属和合金的紧束缚势1506?7分子动力学和密度泛函理论的统一方法1516?7?1第一性原理分子动力学方法1526?7?2多原子体系动力学——C?P运算方法1546?8固体、分子经验电子理论及相关势函数1626?8?1固体、分子经验电子理论1626?8?2过渡金属和合金的结合能公式1646?8?3碱金属和碱土金属的Morse势函数模型1676?8?4固体中Lennard?Jones型势函数的谢氏模型1686?8?5谢氏势函数模型的改进型1726?8?6基于“经验电子理论”的势函数模型的特点及存在的困难174参考文献174第7章金属中的嵌入势模型1777?1嵌入原子法1777?1?1

嵌入原子法基本原理1787?1?2晶体结合能公式1787?1?3由结合能导出的力学性质公式1787?1?4排斥势函数和电子密度函数1797?1?5有效电荷及嵌入能函数1807?1?6作用在每个原子上的合力1817?1?7表面能计算公式1817?1?8采用Rose普适方程的嵌入势函数拟合法1817?1?9嵌入原子法的理论推导简介1827?1?10金属合金中的原子间相互作用势1837?2分析型EAM模型1837?2?1Johnson的分析型EAM模型1847?2?2EAM模型的改进1857?2?3改进的普适分析型EAM模型1857?2?4分析型EAM模型的应用与展望1877?3Finnis?Sinclair经验势函数1887?3?1Finnis?Sinclair (F?S) 模型1887?3?2Finnis?Sinclair模型的改进型1897?3?3Finnis?Sinclair模型的样条函数结构1907?3?4弹性形变和间隙原子能1907?4HCP结构金属的嵌入势模型1917?4?1金属Zr的分析型EAM模型1927?4?2HCP结构金属的分析型F?S模型1947?4?3金属Zr的分析型F?S模型1967?4?4晶格振动问题1967?4?5HCP结构金属的非球对称模型1977?4?6考虑到内弹性常数的HCP结构金属的分析型模型2007?5合金材料中的势函数2077?5?1Johnson对势函数的解析形式2087?5?2Ackland的F?S合金势模型2107?5?3F?S合金势模型用于金属间化合物的研究实例2127?5?4金属间化合物的EAM势模型2177?6Rose普适理论2197?6?1能量和原子间距之间的普适关系2197?6?2普适关系函数221参考文献224第8章Monte Carlo方法2268?1MC方法的基本思想2268?1?1Buffon试验2268?1?2随机事件的概率定义2278?1?3马尔可夫 (Markov) 过程2288?1?4大数定理和中心极限定理2288?2伪随机数的产生和检验2298?2?1产生随机数的方法2308?2?2伪随机数的随机性检验2318?3给定分布的随机数抽样方法2328?3?1离散型随机变量的直接抽样2338?3?2连续分布的随机变量抽样2348?3?3Metropolis抽样法2418?4微正则系综MC方法2448?5正则系综MC方法2468?5?1跃迁概率2468?5?2正则系综的MC模拟法2478?6等温等压系综MC方法2488?7巨正则系综MC方法2498?7?1巨正则系综MC算法之一2498?7?2巨正则系综MC算法之二250参考文献251第9章Monte Carlo方法的应用2529?1MC方法在数值计算中的应用2529?1?1计算定积分2529?1?2解非线性方程组2569?1?3解微分方程2579?2Ising模型2589?2?1磁性材料2599?2?2二元合金2619?2?3Heisenberg连续自由度Ising模型2619?3自由能的计算2639?3?1正则系综自由能的计算2639?3?2二元系金属模型自由能的计算2659?3?3计算任意固体的自由能及其在刚球fcc和hcp相中的应用2669?3?4有相互作用力的Einstein晶体自由能2709?4MC在三维组织和模拟辐射屏蔽中的应用2719?4?1用MC方法模拟材料三维组织及其演变2719?4?2用MC方法求解辐射屏蔽问题273参考文献279第10章计算程序设计方法28010?1晶胞结构设计28010?1?1坐标变换方法28110?1?2HCP晶胞结构程序设计28110?2周期性边界条件的程序设计28410?3分子动力学计算程序设计28610?3?1预测矫正法程序设计28610?3?2原子系综的分子动力学程序设计29010?4METROPOLIS抽样算法292参考文献292附录293附录1可以演示的几个计算程序293例1双原子分子在相空间中的量子轨道和能级293例2监测各次扫描之间可观察量的关联297例3计算氢分子内聚能的程序303例4利用局域自旋密度近似法计算氢原子有效势的程序305例5利用四面体法计算状态密度306例6用EAM法计算铜的原子内聚能和空位形成能309例7sp³杂化轨道间交叠积分的计算312附录2物理学常数315附表1物理学常数315附表2用于低能分子动力学的通用单位316

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>