

<<材料设计理论及其应用>>

图书基本信息

书名：<<材料设计理论及其应用>>

13位ISBN编号：9787030268778

10位ISBN编号：7030268776

出版时间：2010-3

出版时间：科学出版社

作者：任庆利

页数：138

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>

<<材料设计理论及其应用>>

前言

随着计算机技术的发展, 计算材料学正成为材料研究领域的重要分支。除了日益增多的流程参数的计算机控制外, 通过计算机模拟, 深入研究材料的结构、组成及其在各物理、化学过程中微观变化机制以达到材料成分、结构及制备参数的最佳组合, 即以材料设计为目的, 已成为材料科学发展的热点。

材料计算与设计有两大特点: 第一是具有“前瞻性”和“创新性”, 能在更为广阔的范围内进行创新探索。

例如, 在诺贝尔物理学奖获得者江崎玲于奈 (Leo Esaki) 等提出设计半导体超晶格新概念之后, 量子结构的半导体激光器及其他光电子器件取得惊人进展。

第二是计算机可以模拟进行现实中不能或很难实现的实验, 例如材料在极端压力、温度条件下的相变, 模拟原子及以下尺度的研究等, 而且可以验证已有理论, 也可以根据模拟结果修正或完善已有理论, 并可以从模拟研究结果出发指导、改善实验室实验。

因此, 材料计算与设计已成为除实验和理论外解决材料科学中实际问题的第三个重要组成部分, 使材料的研究跳出了传统的“炒菜法”而发展为基于原理的方法。

<<材料设计理论及其应用>>

内容概要

《材料设计理论及其应用》从材料设计的基础出发，重点介绍了材料设计基本方法：蒙特卡罗法，有限元法，第一性原理法，人工神经网络的设计思想、步骤和方法，详细介绍了这些基本方法的相关数学内容，同时，从应用角度介绍了这些方法在材料设计中的设计实例。

《材料设计理论及其应用》适用于从事材料科学、化学、物理学、应用数学方面及其相关行业的科研人员，也可作为高等院校相关专业研究生及高年级本科生的参考书。

<<材料设计理论及其应用>>

书籍目录

前言
第一部分 蒙特卡罗方法
第1章 蒙特卡罗方法的数学基础?? § 1.1 蒙特卡罗方法的基本概念?? § 1.2 积分的蒙特卡罗方法计算?? § 1.3 数学物理方程的蒙特卡罗方法计算??
第2章 蒙特卡罗方法模拟相变?? § 2.1 面心立方体系相图?? § 2.2 超晶格相变的模拟??
第3章 蒙特卡罗方法模拟反应动力学?? § 3.1 解化学反应动力学问题的期望估计方法?? § 3.2 烧结反应过程?? § 3.3 多晶材料的晶粒生长??
参考文献??
第二部分 有限元法
第4章 有限元法?? § 4.1 有限元法简介?? § 4.2 扩展有限元法?? § 4.3 非线性有限元分析??
第5章 有限元分析的数学基础?? § 5.1 变分及其特征?? § 5.2 变分法与欧拉方程?? § 5.3 变分问题的直接方法??
第6章 有限元法在材料设计中的应用?? § 6.1 金属丝的扁平压制?? § 6.2 功能梯度材料?? § 6.3 烧结工艺过程??
参考文献??
第三部分 第一性原理法
第7章 第一性原理法的相关理论计算?? § 7.1 第一性原理法简介?? § 7.2 相关微分方程的求解?? § 7.3 用分离变量法解单电子薛定谔方程?? § 7.4 用变分法求解薛定谔方程?? § 7.5 多重散射X 方法??
第8章 第一性原理在材料设计中的应用?? § 8.1 在氧化环境中的Ag-Cu合金表面?? § 8.2 Cu/MgO (001) 界面?? § 8.3 钛酸铅表面结构和稳定性?? § 8.4 立方钙钛矿结构的SrMO₃ (M=Ti, V, Zr, Nb) 的弹性和电性能??
参考文献??
第四部分 人工神经网络
第9章 人工神经网络发展概述??
第10章 人工神经网络在材料科学中的应用?? § 10.1 BP算法的分析与改进措施?? § 10.2 应用BP神经网络研究镁铝水滑石纳米晶制备工艺?? § 10.3 应用BP神经网络研究水滑石/聚合物纳米复合材料的制备工艺??
参考文献

<<材料设计理论及其应用>>

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>