

<<材料设计教程>>

图书基本信息

书名：<<材料设计教程>>

13位ISBN编号：9787122009838

10位ISBN编号：7122009831

出版时间：2007-9

出版时间：化学工业出版社

作者：赵起勋 编

页数：260

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>

## <<材料设计教程>>

### 内容概要

本书体系分四个层次：首先介绍材料设计的基本概念和内涵，材料设计的主要技术与途径；在主要技术的基础上进一步介绍材料的第一性原理计算、相图热力学设计思路与实例。

然后介绍目前研究和应用比较设计领域的设计方法和所取得的成果，最后以大量图表介绍了目前国际上材料模拟与设计的部分最新研究成果和发展趋势。

本书重点论述各种计算途径的方法、思路、特点、应用及其局限性。

本书既是材料类各本科专业学生的公共知识平台教材，也可以作为课程教学的教材或参考书，还可以作为从事材料工作技术人员的参考书。

## &lt;&lt;材料设计教程&gt;&gt;

## 书籍目录

第1章 材料设计概述1.1 材料设计发展的历史与作用1.1.1 材料设计的发展阶段1.1.2 材料设计的发展概况1.2 材料设计范围与内容1.3 材料设计的层次与特点1.3.1 材料设计的层次1.3.2 多尺度关联模型1.3.3 材料设计的特点1.4 材料设计的类型和方法1.5 材料设计的任务本章小结习题与思考题参考文献第2章 材料设计的主要技术与途径2.1 材料设计的知识库与数据库2.2 材料设计的专家系统2.3 基于第一性原理的计算设计 2.3.1 基本理论的近似假设2.3.2 密度泛函理论2.3.3 准粒子方程(Gw近似)2.3.4 Car—Parrinello方法2.4 材料设计的计算机模拟2.4.1 分子动力学模拟2.4.2 蒙特卡罗模拟2.4.3 人工神经网络在材料设计中的应用2.5 合金特征晶体理论2.5.1 合金相统计热力学理论2.5.2 合金晶体物理与化学计算框架2.6 基于相图计算的材料设计2.6.1 相图热力学计算模型2.6.2 Md法计算相界成分2.6.3 CALPHAD计算模式2.7 基于数据采掘的材料设计2.8 数学方法在材料设计中的应用2.8.1 有限元法2.8.2 遗传算法2.8.3 分形理论2.8.4 其他方法本章小结习题与思考题参考文献第3章 基于第一性原理的材料设计3.1 原子相互作用势的计算应用3.1.1 第一性原理原子间相互作用对势的严格表达3.1.2 陈氏晶格反演定理3.1.3 基于ab initio计算方法的理论模型3.2 高温Ti合金的优化设计 3.2.1 特性原子序列信息3.2.2 fcc-TiAl合金信息3.2.3 降低fcc—TiAl化合物脆性的信息综合3.3 奥氏体钢ab initio计算设计3.3.1 理论基础3.3.2 奥氏体不锈钢模量的计算设计3.4 超硬材料计算设计 3.4.1 超硬材料体积弹性模量3.4.2 B-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的电子结构3.4.3 B-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的计算设计与开发3.4.4 c-BCN设计与开发3.4.5 低压缩系数金属氮化物本章小结习题与思考题参考文献第4章 相图热力学计算设计4.1 相图优化和计算过程4.2 CALPHAD相图计算4.2.1 实际合金集团数据库4.2.2 无铅微焊材料的设计计算4.2.3 超级奥氏体钢相平衡的计算预测4.2.4 Ti合金超塑性的Md法计算...第5章 材料数值模拟设计第6章 基于数据采掘的材料设计与预测第7章 结构复合材料的设计第8章 功能复合材料的设计第9章 材料成型加工过程模拟设计第10章 材料变形与断裂的介观设计第11章 材料表面技术模拟与设计第12章 材料模拟设计研究进展

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>