第一图书网, tushu007.com

<<材料设计>>

图书基本信息

书名：<<材料设计>>

13位ISBN编号：9787561810590

10位ISBN编号：7561810598

出版时间：2000-1

出版时间：天津大学出版社

作者：熊家炯 编

页数：394

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

第一图书网, tushu007.com

<<材料设计>>

内容概要

《材料设计》分别讲述了材料设计综述、探索非线性光学晶体的分子设计学方法、原子相互作用势及材料性能预测、聚合物材料的设计研究等。

第一图书网, tushu007.com

作者简介

熊家炯，1933年生。
清华大学教授，博士生导师。
1960年毕业于前苏联列宁格勒工学院工程物理系，80年代中期在美国麻省理工学院（MIT）物理系访问。
曾任清华大学物理系主任、清华大学理学院常务副院长、清华大学先进材料国家教委开放实验室主任等职。
1987-1994年任国家高技术（863）新材料领域专家委员会常委，1987-1991年任国家超导技术专家委员会委员，在正电子湮没理论研究、半导体超品格电子结构、材料设计研究、低维量子结构特性与计算设计等方面，先后获教育部（国家教委）科技进步奖4次、国家自然科学奖二等奖1次。

第一图书网, tushu007.com

<<材料设计>>

书籍目录

第1章 材料设计综述1.1 什么是材料设计1.2 材料设计的发展概况1.2.1 前期研究的回顾1.2.2 当前面临的挑战1.3 材料设计的范围与层次1.4 材料设计的主要途径1.4.1 材料知识库和数据库技术1.4.2 材料设计专家系统1.4.3 材料设计中的计算机模拟1.4.4 基于第一性原理的计算1.5 基于第一性原理的主要计算方法1.5.1 密度泛函理论1.5.2 准粒子方程，GW近似1.5.3 Car-Parrinello方法1.6 国外研究动态与展望1.6.1 新材料及其理论方法1.6.2 表面与界面的研究概况1.6.3 薄膜、复合材料的设计问题1.6.4 从理论上预报和设计材料1.6.5 当前材料设计的机遇与展望1.7 我国“863”计划中材料设计研究进展及本书概貌参考文献第2章 探索非线性光学晶体的分子设计方法第3章 原子相互作用势及材料性能预测第4章 聚合物材料的设计研究第5章 材料科学中的界面问题第6章 金属缺陷及电子结构与材料设计第7章 数据信息采掘与材料设计的半经验方法第8章 半导体应用中的材料设计问题第9章 原子团簇及其组装材料的计算设计第10章 量子点特性的理论分析与预测第11章 量子化学与材料设计 参考文献

第一图书网, tushu007.com

<<材料设计>>

章节摘录

第1章　材料设计综述　　熊家炯　朱嘉麟　　1.1什么是材料设计　　材料设计（materials design），是指通过理论与计算预报新材料的组分、结构与性能．或者说，通过理论设计来“订做”具有特定性能的新材料。
这当然说的是人们所追求的长远目标，并非目前就能充分实现的。
尽管如此，由于凝聚态物理学、量子化学等相关基础学科的深入发展，以及计算机能力的空前提高，使得材料研制过程中理论和计算的作用越来越大，直至变得不可缺少。
1995年美国国家科学研究委员会（National Research Council，缩写为NRC）邀请众多专家经过调查分析，编写了《材料科学的计算与理论技术》这一专门报告，其中说：“materials by design”（设计材料）一词正在变为现实，它意味着在材料研制与应用过程中理论的份量不断增长，研究者今天已处在应用理论和计算来“设计”材料的初期阶段。
……

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