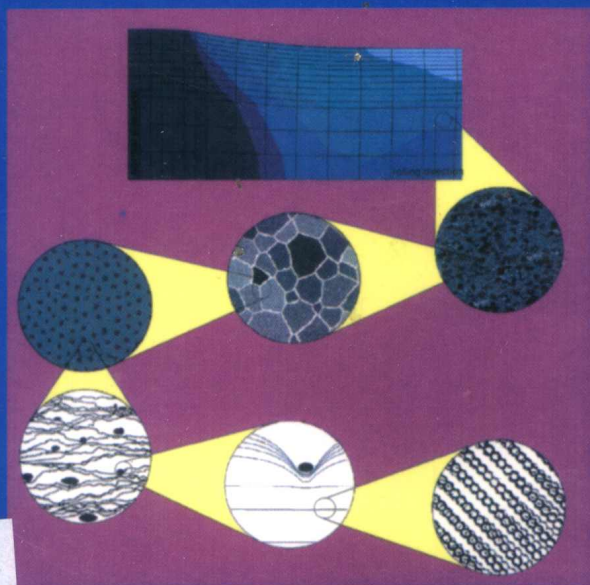


# 计算材料学

[德] D. 罗伯 编著



化学工业出版社

材料科学与工程出版中心

# (京) 新登字 039 号

## 图书在版编目 (CIP) 数据

计算材料学/ [德] D. 罗伯编著; 项金钟, 吴兴惠译.  
北京: 化学工业出版社, 2002. 8

ISBN 7-5025-3908-5

I. 计… II. ①罗…②项…③吴… III. 数学模型-  
应用-材料科学 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 042404 号

Computational Materials science/by Dierk Raabe

ISBN 3-527-29541-0

Copyright© 1998 by WILEY-VCH Verlag GmbH. All Rights Reserved.

本书中文简体翻译版由 WILEY-VCH 出版公司授权化学工业出版社独家出版发行。

未经出版者许可, 不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分。

北京市版权局著作权合同登记号: 01-2001-4841

---

### 计算材料学

[德] D. 罗伯 编著

项金钟 吴兴惠 译

责任编辑: 丁尚林

责任校对: 李 林

封面设计: 潘 峰

\*

化学工业出版社 出版发行  
材料科学与工程出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64982530

<http://www.cip.com.cn>

\*

新华书店北京发行所经销

化学工业出版社印刷厂印刷

三河市延风厂装订

开本 850×1168 毫米 1/32 印张 15 1/4 字数 400 千字

2002 年 9 月第 1 版 2002 年 9 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-3908-5/TQ·1551

定 价: 40.00 元

---

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

## 作 者 前 言

由于数值预测方法在材料科学与工程领域所取得的进步，近年来已发展起来一个新兴的、令人激动的跨学科分支，这就是通常所说的“计算材料学”。它是综合材料科学、物理学、计算机科学、数学、化学以及机械工程等学科而发展起来的。例如材料物理领域，在原子尺度上利用分子动力学和蒙特卡罗方法关于晶格及其缺陷动力学的模拟研究；再例如，机械工程领域与材料有关的关于大尺度结构问题的模拟，是采用有限元法通过平均化本构定律包含了微结构的信息。与这些例子不同，可以认为在经典范畴，材料科学是在介观尺度上关于晶格缺陷及其相互作用的研究。在介观尺度进行模拟预测具有很大的挑战性，因为对此要跨越大的空间和时间尺度，而且还要对复杂多体相互作用现象进行合理描述。为实现这一目的，人们提出了各种新思想，使得我们能够在原子尺度至宏观尺度上，采用离散化方法处理多个独立晶格缺陷的相互作用问题。这些所谓的介观尺度上的模拟方法，包含了采用整体和局域性变换规则的确定性元胞自动机和概率性元胞自动机、金兹堡-朗道型相场动力学方法、位错动力学方法、多晶及非线性晶体塑性有限元模型、几何及组分模型、拓扑网格及顶点模型、多态波茨型蒙特卡罗方法。而且，分子动力学、Metropolis 蒙特卡罗和常规有限元模拟等经典方法也在广泛地使用。

在计算材料学领域，尽管相关的会议论文集、专著及学术期刊很多，而且与年俱增，但是还没有关于这一研究领域系统而全面的综合性著作（参见阅读材料），本书的目的就是弥补这一不足。在本书中，针对材料科学中流行的材料微结构时间-空间离散化模拟的现代方法及其理论背景进行了评述；重点讨论了在介观尺度上材料微结构的时间和空间离散化模拟的基本原理。

本书由五部分组成。第一部分是作为引论和介绍基本原理的基础篇。在第一章概论之后，介绍讨论了标度无关性等模型化和模拟使用的概念、定义和术语，同时阐述了求解微分方程的原理和方法。接下来几部分，按照微结构在时间和空间上的分级概念分别进行了讨论，亦即：纳观至微观尺度的模拟方法（第二部分），微观至介观的模拟方法（第三部分），以及介观至宏观尺度的模拟方法（第四部分）。最后，讨论评述了跨越标度模拟方法之间的集成、模拟与模型化的集成（第五部分）。在第二部分（即纳观至微观层次），集中讨论了各种 Metropolis 蒙特卡罗和分子动力学方法；第三部分（即微观至介观层次）着重阐述了位错动力学、金兹堡-朗道型扩散相场动力学方法、元胞自动机、多态及动力学波茨模型、几何及组分模型、拓扑网格与顶点模型；在第四部分（即介观至宏观层次），分析讨论了大尺度的有限元法、有限差分法和多晶模型。作为补充，每章还讨论了各种模拟方法在材料科学中的典型应用，并给出一些有代表性的例子。

在微观至介观尺度层次，由于模拟方法对于预测微结构演化和微结构与性质相互关系等方面具有特别的意义，因而在第三部分对相应的理论概念和方法进行了较为详细的讨论，并提供了来自塑性、再结晶、晶粒生长现象、固体扩散和相变等领域的应用例子。

在本书附录中，列出了作者推荐的阅读书目，并就计算机科学、高级经验性方法（例如模糊逻辑和人工神经网络）、逾渗理论的一些基本概念进行了简要介绍。

本书是为满足下列两类读者而写的：第一类对象是本科生、研究生、大学教师、材料科学家和工程师；第二类对象是那些倾向于材料科学研究的物理学家、化学家、数学家以及机械工程师。在此，作者欢迎广大读者提出批评和建议。

致谢（略）

D. Raabe

1998年2月于德国·柏林

## 常用缩写词

### 计算材料学中的常用缩写词

bcc	体心立方
BWG	Bragg-Williams-Gorsky 模型
CA	元胞自动机
CCA	经典元胞自动机
CH	Cahn-Hilliard 理论
CRSS	临界解析剪切应力
CVM	集团变分法
DFT	离散傅里叶变换
DOF	自由度
EAM	嵌入原子方法
fcc	面心立方
FC	全约束泰勒模型
FD/FDM	有限差分方法
FE/FEM	有限元方法
FFT	快速傅里叶变换
FHP	Frisch-Hasslacher-Pomeau
GCA	广义元胞自动机
GL	Ginzburg-Landau 型
HF	Hartree-Fock 近似
IMS	模型化与模拟的集成化
LAP	洛斯阿拉莫斯塑性编码
LCAO	原子轨道线性组合
LD	晶格动力学
LDF	局域电子密度泛函理论
LIM	线性迭代方法
LJ	Lennard-Jones 势
MC	蒙特卡罗方法
MD	分子动力学

MFA	分子场近似方法
MRT <sup>2</sup>	Metropolis-Rosenbluth-Rosenbluth-Teller-Teller 方法
NIM	自然迭代法
NN	最近邻
NNN	次最近邻
ODF	取向分布函数
PC	Portevin-Le Chatelier (动应变时效)
RX	再结晶
RC	弛豫约束泰勒模型
RVE	典型体积元
SC	自洽模型

### 计算机科学中的常用缩写词

ANN	人工神经网络
AP	数组处理器, 阵列处理机
ASCII	美国国家信息交换标准代码
ASIC	专用集成电路
bit	二进制数字, 二进制位 (比特)
BLAS	基本线性代数子例程
byte	最小可寻址存储器单位, 字节, 亦即 8 位加一个测试位
CISC	复杂指令集计算机
CM	连接机
CMOS	补偿式金属氧化物半导体
CMOSFET	补偿式金属氧化物场效应晶体管
CPI	循环 (数) 每条指令
CPU	中央处理器, 中央处理单元
ECL	射极耦合逻辑
FLOP/s	浮点运算次数每秒
Gbyte	吉字节, 千兆字节 (10 <sup>9</sup> byte)
GFLOP/s	10 亿次浮点运算每秒
GSI	吉规模集成 (电路)
HPF	高性能 FORTRAN
IC	集成电路
LSI	大规模集成 (电路)
MESFET	半导体场效应晶体管

MFLOP/s	百万（次）浮点运算每秒
MIMD	多指令流-多数据流
MIPS	百万（条）指令每秒
MISD	多指令流-单数据流
MLP	多层感知器（神经网络）
MOSFET	金属氧化物场效应晶体管
MPP	大规模并行处理
MSI	中规模集成（电路）
RISC	精简指令集计算机
SISD	单指令流-单数据流
SIMD	单指令流-多数据流
SOM	自组织图（神经网络）
SSI	小规模集成（电路）
TFLOP/s	太（ $10^{12}$ ）次浮点运算每秒
ULSI	超大规模集成（电路）
VLIW	超长指令字
VLSI	甚大规模集成（电路）

## 常 用 符 号

- $a$ ——化学活性  
 $A$ ——单元面积  
 $\mathbf{A}, A_{ijkl}$ ——自洽模型中的四阶调节张量  
 $A_{MP}$ ——基体与沉淀物之间的界面面积  
 $A^Z$ ——齐纳(Zener)各向异性系数  
 $\mathbf{b}, b_i$ ——伯格矢量  
 $B$ ——磁场  
 $B^{el}$ ——体弹性模量  
 $C_{60}$ ——布克明斯特(Buckminster)富勒烯, 含有 60 个碳原子  
 $c$ ——声速  
 $c, c_p, c_v$ ——热容量, 等压热容量, 定容热容量  
 $c_{vac}$ ——空位平衡浓度  
 $C^M(R)$ ——半径为  $R$  的沉淀物近表面的基体浓度  
 $\mathbf{C}, C_{ijkl}$ ——四阶劲度张量  
 $\mathbf{C}', C'_{ijkl}$ ——Hashin-Shtrikman 劲度张量变量  
 $\tilde{\mathbf{C}}, \tilde{C}_{ijkl}$ ——Hashin-Shtrikman 劲度张量  
 $P$ ——压强  
 $\tilde{D}_i$ ——组分  $i$  的化学扩散系数  
 $D^{gb}$ ——晶界扩散系数  
 $D$ ——扩散系数; 子晶粒(或亚晶粒)尺寸  
 $\epsilon$ ——FEM 近似解的误差  
 $E$ ——弹性模量  
 $E_d$ ——位错芯的能量  
 $E_{kin}$ ——动能  
 $E_{pot}$ ——势能  
 $\mathbf{E}^G$ ——格林-拉格朗日应变张量  
 $\mathbf{F}, F_i$ ——作用力矢量  
 $\mathbf{F}, r_{ij} = \partial r_i / \partial x_j$ ——形变梯度张量



- $\dot{\mathbf{F}}, \dot{r}_{ij} = \partial \dot{r}_i / \partial x_j$  —— 形变梯度速率张量  
 $F$  —— 亥姆霍兹自由能  
 $\tilde{F}$  —— 亥姆霍兹自由能泛函  
 $f(c)$  —— 亥姆霍兹自由能密度  
 $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$  —— 取向, 转动矩阵  
 $\Delta \mathbf{g} = \Delta \mathbf{g}(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$  —— 取向偏差, 或称取向误差  
 $G$  —— 吉布斯自由焓  
 $g$  —— 吉布斯自由焓密度  
 $G_0$  —— 吉布斯自由焓的表面相关部分  
 $G_A$  —— 吉布斯自由焓的表面无关部分  
 $G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  —— 与时间无关的格林张量函数  
 $\hbar = h / (2\pi)$  —— 普朗克常数除以  $2\pi$   
 $H$  —— 焓  
 $H^f$  —— 形成焓  
 $H^m$  —— 移动焓  
 $H$  —— 哈密顿能量算符  
 $H_{\text{Ising}}$  —— 伊辛模型中的哈密顿量  
 $H_{\text{Potts}}$  —— 波茨模型中的哈密顿量  
 $\mathbf{H}, u_{i,j} = \partial u_i / \partial x_j$  —— 位移梯度张量  
 $\dot{\mathbf{H}}, \dot{u}_{i,j} = \partial \dot{u}_i / \partial x_j$  —— 速度梯度张量  
 $\{hkl\} \langle uvw \rangle$  —— 密勒 (Miller) 指数 (滑移系, 晶体取向)  
 $I_1, I_2, I_3$  —— 应力张量的不变量  
 $I$  —— 通过沉淀物表面的扩散流 (通量)  
 $\mathbf{I}$  —— 单位张量  
 $J_1, J_2, J_3$  —— 应力偏量的不变量  
 $J$  —— 交换作用能  
 $j$  —— 粒子流通量, 表示某一时刻单位面积通过的净粒子数  
 $j_B^\alpha$  —— 在  $\alpha$  相中 B 类粒子的通量  
 $\mathbf{K}^{\text{elem}}$  —— 有限元方法中的元素劲度矩阵  
 $k_B$  —— 玻耳兹曼常数  
 $L^*$  —— 自洽模型中的相互作用张量  
 $L_{ij}^\wedge$  —— 动力学算符的对称矩阵  
 $L$  —— 拉格朗日-欧拉函数

- $M_{ij}^0$  —— 把解析剪切应力与应力张量联系起来的几何系数矩阵  
 $m$  —— 质量, 应变速率灵敏度, 迁移率  
 $M$  —— 磁化强度, 泰勒因子  
 $M, M_{ij}$  —— 迁移率系数矩阵, 广义 Schmid 因子的对称部分  
 $M_{ij}^A$  —— 对称 Onsager 动力学算符矩阵  
 $n, n_i$  —— 单位法向矢量  
 $n_0$  —— 电子浓度的平衡值  
 $N$  —— 正则系综中的粒子数  
NVT —— 正则系综  
NVE —— 微正则系综  
NPT —— 等温等压系综  
 $N_i$  —— 第  $i$  种粒子或原子  
 $N_L$  —— 洛施密特 (Loschmidt) 常量,  $6.0210^{23}$  / mol, 阿伏伽德罗常数  
NV $\xi$  —— 巨正则系综  
 $p_1, \dots, p_N$  —— 正则系综中所有  $N$  个粒子的动量矢量  
 $r_1, \dots, r_N$  —— 正则系综中所有  $N$  个粒子的位置矢量  
 $P(\langle s_i \rangle)$  —— 系统处于组态  $\langle s_i \rangle$  的概率  
 $P_i(+), P_i(-)$  —— 分别表示单格座“自旋向上(+)”和“自旋向下(-)”的概率  
 $P_n(k, i)$  —— 集团型关联概率  
 $P, P_i$  —— 体力矢量  
 $p_i$  —— 正则系综中第  $i$  个粒子的动量矢量  
ps —— 皮秒,  $10^{-12}$  s  
 $q_{TF}$  —— 托马斯 (Thomas)-费米 (Fermi) 屏蔽长度的倒数  
 $q_D$  —— 德拜球半径  
 $q_{exp}$  —— 实验观测量  $q$   
 $\langle q[\mathbf{F}(t)] \rangle_{time}$  —— 时间平均  
 $\langle q \rangle_{ens}$  —— 参量  $q$  的系综平均  
 $Q$  —— 激活能  
 $Q_m$  —— 晶界迁移激活能  
 $q, q_i$  —— Rodrigues 矢量  
 $R, R_{ij}$  —— 刚体转动  
 $R$  —— Gibbs-Thomson 方程中的粒子半径  
 $1/R$  —— 晶粒曲率  
 $r_i$  —— 正则系综中第  $i$  个粒子的位置矢量

- $1/R^c$ ——元胞壁的曲率  
 $S_i$ ——微结构参数  
 $S, S_{ijkl}$ ——四阶顺度张量  
 $S', S'_{ijkl}$ ——Hashin-Shtrikman 顺度张量变量  
 $\bar{S}', \bar{S}'_{ijkl}$ ——Hashin-Shtrikman 顺度张量  
 $t_w$ ——“障碍”前的等待时间  
 $t_g$ ——“障碍”之间的滑移时间  
 $T$ ——温度  
 $TV\mu$ ——巨正则系综  
 $T_c$ ——居里温度  
 $\mathbf{T}, T_i$ ——牵引矢量  
 $U$ ——内能  
 $U(\Omega)$ ——在对势中的内聚能的贡献  
 $V$ ——体积  
 $v_F$ ——电子的费米速度  
 $v$ ——界面速度  
 $W$ ——弹性能密度  
 $w(\mathbf{T})$ ——概率函数  
 $(zz)_{ij}$ ——对称性 Christoffel 劲度矩阵  
 $(zz)_{ij}^{-1}$ ——Christoffel 劲度矩阵的逆(矩阵)  
 $Z$ ——配分函数, 正则配分函数

希腊符号

- $\beta$ —— $1/(k_B T)$   
 $\chi$ ——自洽模型中的耦合因子  
 $\Delta$ ——拉普拉斯算符, 增量  
 $\delta_{ij}$ ——克罗内克(Kroneker)符号  
 $\eta(\mathbf{r}, t)$ ——动力学场模型中的结构变量  
 $\boldsymbol{\varepsilon}, \varepsilon_{ij}$ ——应变张量  
 $\varepsilon_{ii}$ ——膨胀, 应变张量的迹  
 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\varepsilon}_{ij}$ ——应变速率张量  
 $\epsilon_{ijk}$ ——全反对莱维(Levi)-齐维塔(Civita)置换算符  
 $\Gamma(t)$ ——相空间中的矢量  
 $\gamma^c$ ——亚晶粒(或称子晶粒)壁的比能  
 $\gamma$ ——活性系数

- $\gamma^i$ ——作用于滑移系  $i$  的剪切应力  
 $\dot{\gamma}^i$ ——作用于滑移系  $i$  的剪切速率  
 $\kappa$ ——与界面常量相关的正常数  
 $\Lambda$ ——第二(类)皮奥拉(Piola)-基尔霍夫(Kirchhoff)张量  
 $\Lambda$ ——介面迁移率  
 $\lambda$ ——拉梅(Lamé)常数,“障碍”间距  
 $\mu$ ——刚度模量,剪切模量;化学势  
 $\mu_{\Lambda}^{\gamma}$ —— $\gamma$ 相中 A 类原子的化学势  
 $\nabla$ ——劈形算符  
 $\nu$ ——泊松比  
 $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ ——欧拉角  
 $\omega_D$ ——德拜频率  
 $\Omega$ ——平均原子体积  
 $\Omega$ ——塑性自旋  
 $\omega, \omega_{ij}$ ——刚体转动,位移梯度张量的反对称部分  
 $\dot{\omega}, \dot{\omega}_{ij}$ ——刚体转动速率  
 $\rho$ ——位错密度;质量密度  
 $\rho_w$ ——在元胞壁中的位错密度  
 $\rho(\Gamma)$ ——相空间密度,概率密度  
 $\sigma_{AM}$ ——基体与粒子之间的比界面能  
 $\sigma, \sigma_{ij}$ ——应力张量  
 $\sigma_{ii}$ ——应力张量的迹  
 $\sigma^h$ ——流体静应力  
 $\sigma^c, \sigma_{ij}^c$ ——微观或局域应力张量(晶粒而言)  
 $\sigma^e, \sigma_{ij}^e$ ——微观应力张量(外界的,基体的)  
 $\Theta$ ——德拜温度  
 $\tau_i$ ——关于滑移系  $i$  的解析剪切应力  
 $\tau_i^{crit}$ ——关于滑移系  $i$  的临界解析剪切应力  
 $\phi$ ——艾里(Airy)应力函数  
 $\psi_{ij}(r_{ij})$ ——对势  
 $\xi(x, t)$ ——朗之万(Langevin)噪声项

## 材料常数(A)

元素	晶格	$a$		$T_m/K$	$E$	$\nu$	$\rho$	$D_0$	$Q$
		$/10^{-10}\text{m}$	$/10^{-10}\text{m}$						
Ag	fcc	4.09		1234	83	0.37	10.5	0.400	1.92
Al	fcc	4.05		933	70	0.34	2.70	1.300	1.55
Au	fcc	4.08		1336	78	0.44	19.32	0.090	1.81
Be	hex	2.27	3.59	1560	305	0.05	1.85	1.370	1.13
Cd	hex	2.98	5.62	594	50	0.44	8.64	0.050	0.79
Cr	bcc	2.88		2163	279	0.21	7.14	0.200	3.19
Co	hcp	2.51	4.07	1765	206	0.31	8.89	0.830	2.95
Cu	fcc	3.62		1356	130	0.34	8.93	0.200	2.05
Fe	bcc	2.87		1809	211	0.29	7.87	5.800	2.92
K	bcc	5.32		337	4	0.35	0.86	0.310	0.42
Mg	hcp	3.21	5.21	923	44	0.29	1.74	1.300	1.40
Mo	bcc	3.15		2888	325	0.30	10.28	0.100	4.01
Na	bcc	4.29		371	9	0.32	0.97	0.240	0.46
Nb	bcc	3.30		2740	104	0.38	8.58	12.000	4.57
Ni	fcc	3.52		1728	202	0.31	8.91	1.300	2.91
Pb	fcc	4.95		600	16	0.44	11.34	0.280	1.05
Pt	fcc	3.92		2062	170	0.39	21.45	0.330	2.95
Sn	tet	5.83		505	54	0.33	7.29	0.780	1.13
Ta	bcc	3.30		3269	185	0.35	16.67	0.120	4.29
Ti	hex	2.95	4.68	1948	116	0.32	4.51	$6\times 10^{-8}$	1.27
U	orth	5.88		1403	120	0.23	18.70	0.002	4.97
V	bcc	3.03		2175	127	0.36	6.09	0.011	2.64
W	bcc	3.17		3683	411	0.28	19.26	5.600	5.92
Zn	hex	2.66	4.95	693	105	0.29	7.14	0.130	0.95
Zr	hex	3.23	5.15	2125	96	0.33	6.51	0.002	1.65

注： $a$  晶格常量  
 bcc 体心立方  
 $c$  垂直于底平面方向上的晶格常数  
 $D_0$  自扩散因子  
 eV 电子伏特  
 $E$  体弹性模量 (300K)  
 fcc 面心立方  
 hcp 六角密集结构  
 hex 六角或六边形结构  
 Lattice 晶格结构 (300K)  
 orth 正交系, 斜方晶系  
 $Q$  自扩散激活能  
 $T_m$  熔点  
 tet 四角晶系  
 $\nu$  泊松比 (300K)  
 $\rho$  密度 (300K)

## 材料常数 (B)

元素	$c_p$ /(J/g·K)	$\sigma$ /(( $\mu\Omega \cdot m$ ) <sup>-1</sup> )	$P$	$T_b$ /K	$M$	$T_D$ /K	ES	$N$ /(10 <sup>22</sup> cm <sup>-3</sup> )
Ag	0.234	62.5	1.9	2483	107.87	225	4d <sup>10</sup> 5s	5.85
Al	0.900	36.2	1.5	2723	26.98	428	3s <sup>2</sup> 3p	6.02
Au	0.130	45.0	2.4	3243	196.97	165	5d <sup>10</sup> 6s	5.90
Be	0.884	15.2	1.5	3043	9.01	1440	2s <sup>2</sup>	12.10
Cd	0.230	13.1	1.7	1038	112.40	209	4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	4.64
Cr	0.460	6.7	1.6	2938	51.97	630	3d <sup>5</sup> 4s	8.33
Co	0.414	11.1	1.8	3173	58.93	445	3d <sup>7</sup> 2s <sup>2</sup>	8.97
Cu	0.385	56.0	1.9	2868	63.54	343	3d <sup>10</sup> 4s	8.45
Fe	0.460	10.0	1.8	3273	55.85	470	3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	8.50
K	2.354	13.3	0.8	1033	39.10	91	4s	1.40
Mg	1.046	21.7	1.2	1380	24.31	400	3s <sup>2</sup>	4.30
Mo	0.255	21.0	1.8	5833	95.94	450	4d <sup>5</sup> 5s	6.42
Na	1.235	20.0	0.9	1165	22.99	158	3s	2.65
Nb	0.272	6.3	1.6	3573	92.91	275	4d <sup>4</sup> 5s	5.56
Ni	0.440	11.5	1.8	3003	58.71	450	3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	9.14
Pb	0.130	4.8	1.8	1998	207.19	105	6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	3.30
Pt	0.134	9.0	2.2	4803	195.09	240	5d <sup>9</sup> 6s	6.62
Sn	0.226	8.3	1.8	2543	118.69	200	5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	3.62
Ta	0.151	6.5	1.5	5698	180.95	240	5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	5.55
Ti	0.527	3.5	1.5	3533	47.90	420	3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	5.66
U	0.117	1.6	1.7	4091	238.03	207	5f <sup>3</sup> 6d7s <sup>2</sup>	4.80
V	0.502	5.3	1.6	3723	50.94	380	3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	7.22
W	0.134	18.0	1.7	6203	183.85	400	5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	6.30
Zn	0.385	16.5	1.6	1179	65.37	327	3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	6.55
Zr	0.276	2.5	1.4	3853	91.22	291	4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	4.29

注:  $c_p$  比热容 (300~400K)       $\sigma$  电导率  
 ES 电子壳层结构       $T_b$  沸点 (0.1MPa)  
 $N$  原子浓度 (300K)       $T_D$  德拜温度  
 $M$  原子质量       $P$  泡令电负性

## 序

由 D. Raabe 博士撰写的这本关于材料科学模拟方面的书，标志着他在计算材料科学与工程的发展过程中迈出了重要一步。计算材料学，作为材料科学领域中的新兴学科，已经逐渐而牢固地建立起来，并吸引了许多科学家从事这方面的研究工作。在本书中，作者系统而详实地阐述了材料模拟中的各种重要的计算方法。本书不仅讨论了各种模拟方法的理论基础和数值解法，而且还给出了各种方法的产生和发展的来龙去脉。值得指出的是，多年来，作者一直活跃在计算材料科学研究领域，并对书中讨论的多种方法作出过创造性贡献。

此外，当所处理的问题是涵盖从土木工程结构（诸如桥梁）至仅有几个原子大小的电子元件的范围时，相应于我们所采用规则的广度，其线度和时间标度都要适当地拓宽。在材料科学中，经常要处理“正”“反”相左的、复杂的机理，因而引入与理论和实验相互补充的第三种有效手段和方法，对于阐释和检验我们对材料结构特性的理解是非常有用的。甚至是诸如平衡相态关系这样一些基本原理，亦将依赖于不需要实验证明的计算方法。令人激动的是，对于那些我们在微结构中非常感兴趣的问题，同连续体方法成功应用于热流、流体流动和机械形变方面的研究一样，微结构预测也获得了巨大成功。可以相信，通过本书，能使读者对材料科学与工程中的计算方法，有一个较为全面的了解。

A. D. Rollet

1998年4月于美国·匹兹堡·卡内基梅隆大学

# 目 录

常用缩写词 .....	I
计算材料学中的常用缩写词 .....	I
计算机科学中的常用缩写词 .....	II
常用符号 .....	IV
材料常数 (A) .....	IX
材料常数 (B) .....	X

## 第一部分 基础篇

第一章 概论 .....	3
第二章 材料科学中的模型化与模拟 .....	13
2.1 几个概念 .....	13
2.2 模型化的基本思想 .....	13
2.3 广义态变量 .....	14
2.3.1 大于原子尺度的模型化概念 .....	14
2.3.2 自变量 .....	16
2.3.3 态变量和因变量 .....	16
2.3.4 运动学方程 .....	17
2.3.5 状态方程 .....	18
2.3.6 结构演化方程 .....	18
2.3.7 各种参数 .....	19
2.3.8 唯象模型化举例 .....	21
2.3.9 解析模型与数值模型 .....	21
2.4 数值模型化与模拟 .....	23
2.5 模型的基本范畴 .....	26
2.5.1 空间尺度 .....	26



2.5.2	空间维度 (数)	26
2.5.3	空间离散化	27
2.5.4	预测性特征	30
2.5.5	描述性特征	31
2.5.6	路径相关性	32
2.6	系列 (Round-Robin) 检验法	33
<b>第三章 微分方程原理及其解法</b>		
3.1	微分方程导论	35
3.2	偏微分方程的解法	39
3.3	有限差分 (FD) 方法的基本原理	41
3.3.1	时间离散化	41
3.3.2	有限差分方法的数值误差	42
3.3.3	欧拉 (Euler) 方法	43
3.3.4	跳步 (Leap-Frog) 法	46
3.3.5	预测-校正法	47
3.3.6	科兰克-尼科尔森 (Crank-Nicholson) 法	47
3.3.7	龙格-库塔 (Runge-Kutta) 法	48
3.4	有限 (FE) 法的基本原理	49
3.4.1	离散化和有限元法的基本步骤	49
3.4.2	里茨 (Ritz) 变分法	54

## 第二部分 纳观至微观尺度的模拟方法

<b>第四章</b>	<b>基本原理</b>	59
<b>第五章</b>	<b>原子尺度模拟的统计力学</b>	65
<b>第六章</b>	<b>蒙特卡罗 (Monte Carlo) 积分与模拟</b>	74
6.1	引言和原理	74
6.2	几点历史注释	77
6.3	随机数	77
6.4	无规行走模拟	79
6.5	随机抽样积分	80