

علم مواد محاسباتی

مؤلف: جون. جی. لی

ترجمه:

مهندس زیلا کریمیان

(دانش آموخته رشته فیزیک هسته‌ای)

مهندس پویا کریمیان

(دانش آموخته رشته مهندسی مواد)

سرشناسه	: لی، جون گان Lee, June Gunn
عنوان و نام پدیدآور	: علم مواد محاسباتی = Computational Materials Science / مؤلف جون. جی. لی؛ ترجمه ژيلا کریمیان، پویا کریمیان.
مشخصات نشر	: تهران: موسسه آموزشی تالیفی ارشدان، ۱۳۹۹.
مشخصات ظاهری	: ۴۸۶ ص.
شابک	: ۹۷۸-۶۲۲-۲۵۱-۶۳۴-۵
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
یادداشت	: عنوان اصلی: Computational materials science : an introduction, ۲۰۱۷.
موضوع	: مهندسی مواد -- شبیه سازی کامپیوتری
موضوع	: Materials science -- Computer simulation
موضوع	: مهندسی مواد -- داده پردازی
موضوع	: Materials science -- Data processing
شناسه افزوده	: کریمیان، ژيلا، ۱۳۶۸ - مترجم
شناسه افزوده	: کریمیان، پویا، ۱۳۷۱ - مترجم
رده بندی کنگره	: ۲۳۰.۴۳۸
رده بندی دیویی	: ۶۷۰.۱۱
شماره کتابشناسی ملی	: ۶۱۰۰۷۴



ارشادان

مؤسسه آموزشی تالیفی ارشدان

علم مواد محاسباتی	■ نام کتاب:
ژيلا کریمیان - پویا کریمیان	■ ترجمه:
آموزشی تالیفی ارشدان	■ ناشر:
اول	■ ویرایش:
اول ۱۳۹۹	■ نوبت چاپ:
www.irantypist.com	■ طراح و گرافیکست:
۹۷۸-۶۲۲-۲۵۱-۶۳۴-۵	■ شابک:
۱۰۰۰	■ شمارگان:
www.arshadan.com	■ مرکز خرید آنلاین:
www.arshadan.net	■ مرکز پخش و توزیع:
۰۲۱۴۷۶۲۵۵	■ قیمت:
۵۰۰۰۰ تومان	

۱-۱ علم مواد محاسباتی.....	۲۷
۱-۱-۱ موجودیت انسان در برابر ماده.....	۲۷
۲-۱-۱ علم مواد محاسباتی.....	۲۹
۱-۲-۱-۱ اهداف.....	۲۹
۲-۱-۱-۲ رویکرد پیش‌رو.....	۳۰
۲-۱ روش‌های علم مواد محاسباتی.....	۳۱
۱-۲-۱-۱ یکردهای اساسی در علم مواد محاسباتی.....	۳۱
۲-۲-۱-۲ آنالیز اجزاء محدود.....	۳۳
۳-۲-۱ روش مونته‌کارلو.....	۳۴
۴-۲-۱ دینامیک مولکولی.....	۳۴
۵-۲-۱ روش‌های اصول اولیه روش‌های (ab initio).....	۳۵
۶-۲-۱ ملاحظات.....	۳۵
۳-۱ رایانه‌ها.....	۳۶
منابع.....	۳۷
۱-۲ مقدمه.....	۴۲
۱-۱-۲ مدل اتمی در روش دینامیک مولکولی.....	۴۳
۲-۱-۲ مکانیک کلاسیک.....	۴۴
۳-۱-۲ دینامیک مولکولی.....	۴۵
۲-۲ پتانسیل‌ها.....	۴۷
۱-۲-۲ پتانسیل‌های جفت.....	۴۹
۲-۲-۲ پتانسیل‌های روش اتم تعبیه شده.....	۵۲
۳-۲-۲ پتانسیل ترسوف.....	۵۶

۴-۲-۲ پتانسیل‌های مربوط به جامدات یونی	۵۷
۵-۲-۲ پتانسیل‌های میدان نیروی واکنشی	۵۹
۳-۲ راه‌کارهایی برای حل معادلات حرکتی نیوتن	۵۹
۱-۳-۲ سیستم N اتمی	۶۰
۲-۳-۲ الگوریتم ورله	۶۲
۳-۳-۲ الگوریتم سرعت ورله	۶۴
۴-۳-۲ الگوریتم پیشگو-مصحح	۶۵
۴-۲ ارزش‌دهی ۱ بیه	۶۶
۱-۴-۲ پیش تنظیمات	۶۶
۱-۱-۴-۲ پتانسیل قطع	۶۷
۲-۱-۴-۲ شرایط مرزی متناوب	۷۰
۳-۱-۴-۲ فهرست همسایگان	۷۱
۲-۴-۲ ارزش‌دهی اولیه	۷۲
۱-۲-۴-۲ تعداد اتم‌ها (اندازه سیستم)	۷۲
۲-۲-۴-۲ موقعیت‌های مکانی و سرعت‌های اولیه	۷۲
۳-۲-۴-۲ گام‌زمانی	۷۳
۴-۲-۴-۲ زمان شبیه‌سازی کل	۷۴
۵-۲-۴-۲ انواع مجموعه‌ها (آنسامل‌ها)	۷۴
۵-۲ انتگرال‌گیری / متعادل‌سازی	۷۷
۱-۵-۲ کنترل دما و فشار	۷۷
۲-۵-۲ کمینه‌سازی در یک اجرای دینامیک مولکولی استاتیک	۷۹
۱-۲-۵-۲ روش تندترین شیب	۷۹
۲-۲-۵-۲ روش گرادیان‌های مزدوج	۷۹

۶-۲ تولید داده.....	۸۰
۱-۶-۲ تجزیه و تحلیل اجرا.....	۸۱
۱-۱-۶-۲ بایستگی انرژی.....	۸۱
۲-۱-۶-۲ بررسی کمینه مطلق.....	۸۱
۳-۱-۶-۲ میانگین‌های زمانی طبق فرضیه ارگودیک.....	۸۲
۴-۱-۶-۲ خطاها.....	۸۳
۲-۶-۲ انرژی.....	۸۳
۳-۶-۲ خصوصیات محاسباتی.....	۸۴
۱-۳-۶-۲ ثابت تماس شبکه انرژی همبستگی.....	۸۵
۲-۳-۶-۲ مدول بالک.....	۸۵
۳-۳-۶-۲ ضریب انبساط حرارتی.....	۸۵
۴-۳-۶-۲ تابع توزیع شعاعی.....	۸۶
۴-۶-۲ میانگین مربع جابجایی.....	۸۷
۵-۶-۲ علوم انرژی، خصوصیات ترمودینامیکی و غیره.....	۸۸
منابع.....	۸۹
۱-۳ منحنی پتانسیل آلومینیوم.....	۹۳
۱-۱-۳ فایل‌های ورودی.....	۹۴
۱-۱-۳ فایل اجرا.....	۹۵
۲-۱-۳ فایل پتانسیل.....	۹۶
۲-۱-۳ اجرا.....	۹۷
۳-۱-۳ نتایج.....	۹۸
۱-۳-۱-۳ منحنی انرژی پتانسیل.....	۹۸
۲-۳ ذوب خوشه نیکل.....	۱۰۰

۱-۲-۳	فایل اجرا	۱۰۱
۲-۲-۳	نتایج	۱۰۳
۱-۲-۲-۳	تصویرسازی به کمک MDLChimeSP6	۱۰۴
۳-۳	پخت نانوذرات نیکل	۱۰۵
۱-۳-۳	فایل ورودی	۱۰۵
۲-۳-۳	نتایج	۱۰۸
۴-۳	توزیع سرعت ۱۴: آرگون (پژوهش رایانه‌ای)	۱۰۹
۱-۴-۳	فایل ورودی	۱۱۲
۲-۴-۳	نتایج	۱۱۵
۵-۳	لایه‌نشانی SiC بر روی Si (۱)	۱۱۵
۱-۵-۳	فایل ورودی	۱۱۶
۲-۵-۳	نتایج	۱۱۹
۶-۳	مکانیسم تسلیم نانوسیمی از جنس طلا	۱۲۱
۱-۶-۳	فایل ورودی	۱۲۲
۲-۶-۳	نتایج	۱۲۴
۱-۲-۶-۳	تصاویر لحظه‌ای	۱۲۴
۳-۶-۳	نتیجه‌گیری	۱۲۵
۷-۳	محیط شدن نانوقطره آب توسط نانونوار گرافنی	۱۲۵
۱-۷-۳	فایل‌های ورودی	۱۲۶
۱-۱-۷-۳	فایل موقعیت‌ها (data.C-H2O)	۱۲۶
۲-۱-۷-۳	فایل ورودی	۱۲۸
۲-۷-۳	نتایج	۱۲۹

۱۳۱	۳-۷-۳ نتایج	۱۳۱
۱۳۲	۸-۳ کشش نانولوله کربنی	۱۳۲
۱۳۲	۱-۸-۳ مقدمه	۱۳۲
۱۳۳	۲-۸-۳ فایل ورودی	۱۳۳
۱۳۶	۳-۸-۳ <i>readdata.CNT</i>	۱۳۶
۱۳۷	۴-۸-۳ <i>CH.old.aire'o</i>	۱۳۷
۱۳۷	۱-۸-۳ نتایج	۱۳۷
۱۳۹	۹-۳ کشش بلیک (۴)	۱۳۹
۱۴۰	۱-۹-۳ مقدمه	۱۴۰
۱۴۰	۲-۹-۳ فایل ورودی	۱۴۰
۱۴۳	۳-۹-۳ نتایج	۱۴۳
۱۴۵	۱۰-۳ کامپوزیت تحت کشش <i>Si-CNT</i>	۱۴۵
۱۴۶	۱-۱۰-۳ مقدمه	۱۴۶
۱۴۷	۲-۱۰-۳ پتانسیل ها	۱۴۷
۱۴۸	۳-۱۰-۳ فایل های ورودی	۱۴۸
۱۵۳	۴-۱۰-۳ اجرا	۱۵۳
۱۵۳	۵-۱۰-۳ نتایج	۱۵۳
۱۵۵	۶-۱۰-۳ نتایج	۱۵۵
۱۵۶	۱۱-۳ <i>ZrO₂-Y₂O₃-MSD</i>	۱۵۶
۱۵۶	۱-۱۱-۳ مقدمه	۱۵۶
۱۵۷	۲-۱۱-۳ فایل های ورودی	۱۵۷
۱۶۰	۳-۱۱-۳ اجرا	۱۶۰
۱۶۰	۴-۱۱-۳ نتایج	۱۶۰

منابع.....	۱۶۲
۱-۴ مکانیک کوانتومی: پیدایش.....	۱۶۹
۱-۴-۱ نیلز بور و ماهیت کوانتومی الکترون‌ها.....	۱۷۰
۱-۴-۲ دوپروی و ماهیت دوگانه الکترون‌ها.....	۱۷۳
۱-۴-۳ شرودینگر و معادله موج.....	۱۷۴
۱-۴-۴ ایزنبرگ و ماهیت عدم قطعیت الکترون‌ها.....	۱۷۶
۱-۴-۵ ملاحظات.....	۱۷۸
۱-۴-۲ معادله موج شرودینگر.....	۱۷۸
۱-۲-۴ ساده‌سازی معادله.....	۱۷۸
۱-۲-۴-۱ چشم‌پوشی از $\hbar$ ، انرژی، و زمان.....	۱۷۹
۱-۲-۴-۲ چشم‌پوشی از هسته و اسپین.....	۱۸۰
۱-۲-۴-۳ چشم‌پوشی از حالت‌های برانگیخته.....	۱۸۰
۱-۲-۴-۴ استفاده از واحدهای اتمی.....	۱۸۱
۱-۲-۴-۲ معادله موج الکترونی مستقل از زمان.....	۱۸۲
۱-۲-۴-۳ عملگر انرژی: هامیلتونی H	۱۸۳
۱-۲-۴-۴ امواج و معادله موج.....	۱۸۵
۱-۴-۲-۴ موج مسطح.....	۱۸۷
۱-۴-۲-۴ موج ایستاده.....	۱۸۸
۱-۴-۲-۴ اصل برهم‌نهی امواج.....	۱۸۹
۱-۴-۲-۴ تمیزناپذیری الکترون‌ها.....	۱۹۰
۱-۴-۵ انرژی E	۱۹۰
۱-۴-۶ حل معادله موج شرودینگر: الکترون موجود درون چاه.....	۱۹۱
۱-۴-۶-۱ الکترون موجود درون چاه نامحدود تک‌بعدی.....	۱۹۱

۱۹۴	۲-۶-۲-۴ الکترون درون چاه تک‌بُعدی با پتانسیل محدود
۱۹۵	۲-۶-۲-۴ اتم هیدروژن
۱۹۶	۲-۶-۴ حالت‌های تبهگنی
۱۹۶	۳-۴ محاسبات مقدماتی اصول اولیه
۱۹۷	۱-۳-۴ مسئله n -الکترون
۱۹۷	۲-۳-۴ روش هارتری: مدل تک الکترون
۲۰۰	۳-۳-۴ روش هارتری-فاک
۲۰۰	۱-۳-۳-۴ عبارت Ψ
۲۰۲	۲-۳-۳-۴ راست‌هم‌بازی تمام موج
۲۰۳	۲-۳-۳-۴ عبارت E
۲۰۵	۴-۳-۳-۴ محاسبه E
۲۰۷	۵-۳-۳-۴ رهیافت وردشی برای جستجوی انرژی حالت پایه
۲۰۸	۶-۳-۳-۴ رهیافت خودسازگاری
۲۰۹	۷-۳-۳-۴ ملاحظات
۲۰۹	منابع
۲۱۴	۱-۵ مقدمه
۲۱۶	۱-۱-۵ چگالی الکترون
۲۱۸	۱-۱-۱-۵ چگالی الکترون در DFT
۲۱۹	۲-۱-۵ قضایای هوهنبرگ-کوهن
۲۱۹	۱-۲-۱-۵ چگالی الکترون در نقش بازیکن میانی
۲۲۰	۲-۲-۱-۵ جستجوی برای انرژی حالت پایه
۲۲۲	۲-۵ رهیافت کوهن-شم
۲۲۳	۱-۲-۵ بازنمایی‌های تک الکترونی

۲۲۴.....	۲-۲-۵ سیستم تک الکترون بجای n -الکترون
۲۲۶.....	۳-۵ معادلات کوهن-شم
۲۲۷.....	۱-۳-۵ انرژی
۲۲۷.....	۱-۱-۳-۵ انرژی جنبشی
۲۲۸.....	۲-۱-۳-۵ انرژی خارجی
۲۲۹.....	۳-۳-۵ انرژی هارتری
۲۳۰.....	۲-۳-۵ انرژی تبادل-همبستگی
۲۳۱.....	۵-۱-۳-۵ انرژی عباد-انرژی
۲۳۳.....	۲-۳-۵ مشتق‌های تابع
۲۳۶.....	۳-۳-۵ معادلات کوهن-شم
۲۳۸.....	۱-۳-۳-۵ اوربیتال‌های کوهن-شم
۲۳۹.....	۲-۳-۳-۵ مقادیر ویژه کوهن-شم
۲۳۹.....	۴-۵ تابعی‌های تبادل-همبستگی
۲۴۲.....	۱-۴-۵ حفره تبادل-همبستگی
۲۴۲.....	۱-۱-۴-۵ حفره تبادل
۲۴۳.....	۲-۱-۴-۵ حفره همبستگی
۲۴۳.....	۳-۱-۴-۵ حفره تبادل-همبستگی
۲۴۵.....	۲-۴-۵ تقریب موضعی چگالی
۲۴۶.....	۱-۲-۴-۵ گاز الکترونی همگن
۲۴۶.....	۲-۲-۴-۵ انرژی تبادل
۲۴۷.....	۳-۲-۴-۵ انرژی همبستگی
۲۴۷.....	۴-۲-۴-۵ انرژی تبادل-همبستگی
۲۴۹.....	۵-۲-۴-۵ ملاحظات

۳-۴-۵ تقریب گرادیان تعمیم یافته	۲۵۰
۱-۳-۴-۵ تقریب PW91	۲۵۲
۲-۳-۴-۵ تقریب PBE	۲۵۲
۴-۴-۵ دیگر تابعی‌های تبادلی-همبستگی	۲۵۴
۵-۴-۵ ملاحظات	۲۵۵
۱-۵-۴-۵ قابلیت‌های عمومی تقریب GGA	۲۵۶
۵-۵-۴-۵ محدودیت‌های تقریب GGA: سیستم‌های کاملاً همبسته	۲۵۶
۵-۴-۵-۴ محدودیت‌های تقریب GGA: کم برآوردن باندگپ	۲۵۷
۵-۵-۴-۵ حل معادلات نوی-ش	۲۵۸
۱-۵-۵ مقدمه	۲۵۹
۱-۱-۵-۵ خودسازگاری	۲۵۹
۲-۱-۵-۵ اصل وردشی	۲۵۹
۳-۱-۵-۵ قیدها	۲۶۰
۲-۵-۵ قطری‌سازی مستقیم	۲۶۱
۳-۵-۵ قطری‌سازی تکراری	۲۶۱
۱-۳-۵-۵ انرژی کل و دیگر خصوصیات	۲۶۳
۶-۵ قابلیت‌ها و محدودیت‌های DFT	۲۶۴
۱-۶-۵ توانایی‌های DFT	۲۶۵
۱-۱-۶-۵ نظریه تابعی چگالی اسپین-پلاریزه	۲۶۵
۲-۱-۶-۵ نظریه تابعی چگالی همراه با اشغال‌های کسری	۲۶۶
۳-۱-۶-۵ نظریه تابعی چگالی برای حالت‌های برانگیخته	۲۶۶
۴-۱-۶-۵ نظریه تابعی چگالی دما محدود	۲۶۷
۵-۱-۶-۵ نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان	۲۶۸