

<<掺杂材料分子模拟与计算>>

图书基本信息

书名：<<掺杂材料分子模拟与计算>>

13位ISBN编号：9787030335531

10位ISBN编号：7030335538

出版时间：2012-2

出版时间：科学出版社

作者：张培新，陈建华，魏群 等著

页数：290

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>

## <<掺杂材料分子模拟与计算>>

### 内容概要

《掺杂材料分子模拟与计算》主要介绍了分子动力学、第一性原理和晶体场等相关理论及其在锂离子电池正极材料、光催化材料、光学材料模拟与计算方面的应用，在原子及电子层次上揭示了材料结构与性能的本质，为掺杂材料的合成与设计以及离子掺杂理论的探索提供可资借鉴的重要理论、方法和技术手段。

《掺杂材料分子模拟与计算》适合于材料设计与计算、凝聚态物理学、计算机科学以及资源环境科学等领域的科研人员、技术人员阅读，也可供大专院校相关专业师生参考。

## &lt;&lt;掺杂材料分子模拟与计算&gt;&gt;

## 书籍目录

## 前言

## 第一章 绪论

## 1.1 掺杂锂离子电池正极材料

1.1.1 掺杂LiFePO<sub>4</sub>材料1.1.2 掺杂LiCoO<sub>2</sub>材料1.1.3 掺杂LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>材料1.1.4 掺杂LiNiO<sub>2</sub>材料1.2 掺杂TiO<sub>2</sub>光催化材料

## 1.2.1 金属离子掺杂

## 1.2.2 稀土离子掺杂

## 1.2.3 多金属掺杂

## 1.2.4 薄膜掺杂

## 1.3 锂离子电池正极材料计算与模拟

1.4 掺杂TiO<sub>2</sub>计算与模拟

## 1.5 掺杂光学材料计算

## 参考文献

## 第二章 掺杂磷酸铁锂电子结构计算

## 2.1 第一性原理简介

## 2.1.1 分子体系定态Schrodinger方程

## 2.1.2 分子轨道法

## 2.1.3 密度泛函理论

## 2.2 计算软件及方法简介

## 2.2.1 交换-相关函数测试

## 2.2.2 赝势测试

2.3 LiFePO<sub>4</sub>电子结构的第一性原理计算2.3.1 理想LiFePO<sub>4</sub>的电子结构——能带结构和态密度分析2.3.2 金属离子掺杂对LiFePO<sub>4</sub>电子结构的影响

## 2.3.3 掺杂量对电子结构的影响

2.3.4 空位型缺陷对LiFePO<sub>4</sub>电子结构的影响2.4 碳包覆LiFePO<sub>4</sub>的第一性原理计算

## 2.4.1 计算方法

## 2.4.2 切面位置的影响

2.4.3 LiFePO<sub>4</sub>(010)表面结构弛豫2.4.4 C吸附LiFePO<sub>4</sub>(010)表面

## 参考文献

## 第三章 磷酸铁锂离子扩散分子动力学模拟

## 3.1 分子动力学模拟方法及计算模型

## 3.1.1 分子动力学模拟理论

## 3.1.2 势能函数

## 3.1.3 系综、配分函数

## 3.1.4 势函数参数

## 3.1.5 运行和统计

3.2 LiFePO<sub>4</sub>材料分子动力学模拟方法及参数的选择

## 3.2.1 模拟方法

## 3.2.2 离子间相互作用势的确定

## <<掺杂材料分子模拟与计算>>

3.2.3 势参数的合理性验证

3.3 LiFePO<sub>4</sub>材料离子扩散动力学的分子动力学模拟

3.3.1 模拟过程体系状态

3.3.2 微观结构

3.3.3 熔点的推测

3.3.4 离子扩散动力学

3.3.5 锂离子扩散通道

3.3.6 温度对扩散系数影响

3.3.7 晶体生长方向对扩散的影响

参考文献

第四章 掺杂二氧化钛光催化材料结构与性质的计算模拟

4.1 计算模型与方法

4.1.1 计算模型

4.1.2 计算方法

4.2 第一过渡元素

4.2.1 杂质替换能和二氧化钛晶格常数

4.2.2 理想锐钛矿型TiO<sub>2</sub>能带结构

4.2.3 掺杂原子对TiO<sub>2</sub>的能带和态密度的影响

4.2.4 杂质能级

4.3 其他过渡元素(Ag、W)掺杂TiO<sub>2</sub>

.....

第五章 掺杂FeS<sub>2</sub>光学性质与电子结构计算

第六章 掺杂ZnS半导体性质与电子结构计算

第七章 晶体场理论基础与计算方法

第八章 尖晶石结构掺杂材料自旋哈密顿参量计算

第九章 掺杂激光基质晶体材料晶格缺陷与局域结构

## &lt;&lt;掺杂材料分子模拟与计算&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：插图：3.1.4 势函数参数势函数参数正确可靠与否是MD成功的关键，因此获取可靠的并且符合该体系的势参数显得相当重要。

势函数参数可以采用多种方法获得，主要有第一性原理方法和经验方法。

对于粒子的电荷，可以通过第一性原理模拟采用布居分析的方法获得，如Mulliken方法，Bader方法，或者Natural Populationanalysis，Wiberg和Rablen对这类方法作了详尽的评述；其他参数可以通过拟合第一性原理计算的数据或实验数据获得。

当然也可以通过拟合势能曲面来获得。

一般来说，势函数的参数要经过反复的实验改进，力争能够逼近尽量多的实验或第一性原理计算数据。

势函数参数也可以通过经验（empirical）途径获得，经验方法将晶体中离子相互作用模型化，通过调整既定模型中所涉及的参数使基于它们对理想完善晶体一系列物理性质的计算值与实验有尽可能的符合（即经验参数化，parameter-ization）。

通过这样的拟合结果一方面可以评估模拟模型质量；另一方面，涉及经验模型及势函数的参数集值确定后，离子之间的相互作用就完全确定了，从而可以进一步用它研究晶体的无序或局域态问题。

3.1.5 运行和统计通常对一个体系的模拟都是从体系的基态（ $T=0$ 下能量最稳定的状态）开始的。

一般可以利用特定的晶体结构来构造这个体系。

而更重要的是在初始结构中引进随机的量。

假设初始的原子都处于平衡位置，那么加在原子上的净作用力为零，所有的原子都会永远待在平衡位置上。

因此给初始结构一定的随机改变很有意义，通常采用的方式有两种：在晶格位置上加一个小的随机的偏移量，通常是晶格间距的几个百分比；原子的初始速度按照给定温度 $T$ 下的麦克斯韦分布选取，不过这样得到的体系会具有一个小的初始质心速度，一般可在每个原子的速度里减去这个质心速度。

一旦初始结构确定了，体系之后随时间的演变也就完全被确定下来了。

## <<掺杂材料分子模拟与计算>>

### 编辑推荐

《掺杂材料分子模拟与计算》是由科学出版社出版的。

<<掺杂材料分子模拟与计算>>

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>