

(3036)《计算材料学》专业综合

考试内容：

1. 材料计算的物理基础：能带理论；密度泛函；凝胶模型与金属的功函数。
2. 计算机模拟基础：分子动力学方法；固体的原子扩散；晶体生长模拟。
3. 材料科学中的模型化与模拟：
4. Monte Carlo 方法：Monte Carlo 方法基础；Monte Carlo 模拟算法；应用举例。
5. 陶瓷材料设计：材料设计的概念与方法论；陶瓷材料特性设计；合成方法设计。
6. 材料强度与断裂的模拟：材料强度模拟；晶体结构与机械性质；新物质的机械性质预测；断裂的模拟计算。
7. 新材料设计。

参考书目：

1. 吴兴惠，项金钟．现代材料计算与设计教程．北京：电子工业出版社，2002
2. [德]D. 罗伯．项金钟，吴兴惠 译．计算材料学．北京：化学工业出版社，2002