

<<复杂晶体化学键的介电理论及其应>>

图书基本信息

书名：<<复杂晶体化学键的介电理论及其应用>>

13位ISBN编号：9787030153388

10位ISBN编号：7030153383

出版时间：2005-5

出版时间：科学分社

作者：张思远

页数：180

字数：221000

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>

<<复杂晶体化学键的介电理论及其应>>

内容概要

本书详细地阐述了介电描述的晶体化学键理论和方法，特别是复杂晶体化学键的介电理论方法，为研究复杂体系的性质开辟了一种新途径。

书中利用该理论方法不仅计算了大量复杂晶体的化学键参数，还展示了应用于非线性光学系数，高温超导体化学键分析，晶体环境对晶体功能性质的影响，复杂晶体晶格能等性质的计算方法和过程。

本书包括基本概念、理论分析、公式推导、数据结果和应用等几部分内容，同时，书中还为科学研究和实际应用提供了一些有用的数据和规律性内容。

本书可供从事材料科学、理论化学、固体物理和无机化学方面的科研工作者，高等学校教师和研究生参考。

<<复杂晶体化学键的介电理论及其应>>

书籍目录

前言第1章 化学键的概念和定义 1.1 化学键的发展简史 1.2 现代化学键理论 1.3 几种化学键理论的定义 1.3.1 鲍林的离子性定义 1.3.2 考尔松的离子性定义 1.3.3 桑德森的离子性定义 参考文献第2章 二元晶体化学键的介电理论 2.1 Phillips-Van Vechten的介电理论 2.2 Levine的介电理论 2.3 二元化合物晶体的化学键性质 2.4 二元化合物晶体的介电行为 2.5 晶体中的离子半径 2.6 晶体中离子的极化 2.7 二元晶体的热膨胀与化学键 参考文献第3章 复杂晶体化学键的介电理论 3.1 复杂晶体化学键的理论方法 3.2 复杂晶体的化学键性质 3.2.1 含Y的光学晶体的化学键性质 3.2.2 立方钙钛矿型复合氟化物晶体的化学键和离子行为 3.2.3 Ln₂O₂S晶体的化学键 3.2.4 LnOX (X=Cl, Br, I) 晶体的结构和化学键 3.2.5 稀土乙基硫酸盐晶体的化学键 3.2.6 混价稀土晶体的化学键 3.2.7 复合硫化物的结构和化学键 3.2.8 三元黄铜矿型晶体的化学键 3.2.9 其他类型晶体 参考文献第4章 晶体的化学键和非线性光学效应第5章 高温超导体的化学键性质第6章 晶体的环境效应和电子云扩大效应第7章 穆斯堡尔效应 - 同质量异能位移第8章 晶体的晶格能和硬度附录

章节摘录

第1章 化学键的概念和定义 1.2 现代化学键理论 现代化学键理论是以海特勒 - 伦敦 (Heitler-London) 用量子力学方法处理氢分子结构问题为开端发展起来的, 它是在开库勒和布特列洛夫的结构理论, 路易斯的电子理论以及现代物理学成就的基础上发展起来的。物理学的成就不仅为化学键理论提供了坚实的物理基础, 同时在实验上也提供了一系列新的测定分子结构的方法, 从而进一步明确了化学键的本质是相邻原子间强烈吸引的相互作用, 并且知道了化学键有多种类型, 其中主要的三种是电价键、共价键和金属键。

电价键中最主要的是离子键, 当电离能小的金属原子和电子亲和能很大的非金属原子相互接近时, 前者失去电子而成为正离子, 后者获得电子使外电子层充满而成为负离子, 正负离子由于库仑作用而相互吸引, 但当它们充分接近时, 离子的电子云之间又将产生排斥力, 当吸引力和排斥力相等时形成稳定的离子键。

近来研究表明, 对于离子键来说, 不存在100%离子性, 也就是金属原子的价电子不是100%地迁移到非金属原子中去。

共价键是原子间共有电子而形成的键, 也可以称为原子键, 构成共价键的电子云中心可以在两个原子中间, 也可以偏离中心, 前者产生的电偶极矩为零, 后者产生的电偶极矩不为零, 偶极矩等于零的键称为非极性键, 不等于零的共价键称为极性键。

共价键是原子轨道重叠而形成的化学键, 满足最大重叠原理, 因此, 共价键具有和离子键不同的特性, 即方向性和饱和性。

.....

<<复杂晶体化学键的介电理论及其应>>

编辑推荐

本书内容是复杂晶体性质研究这一领域的理论和应用的主要结果的汇总，从简单晶体到复杂晶体，从基本理论到实际应用。

其中主要是十余年来我们在复杂晶体方面的理论发展和实际应用，也包括了国外在这一领域的一些主要结果。

希望本书内容能为复杂体系的材料设计和性质预测提供一种可能的理论方法。

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>