

<<无机晶体的结构、组成和性质 - 晶>>

图书基本信息

书名：<<无机晶体的结构、组成和性质 - 晶格能、热膨胀、体模量和硬度>>

13位ISBN编号：9787030330314

10位ISBN编号：7030330315

出版时间：2012-1

出版时间：科学出版社

作者：张思远

页数：260

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>

<<无机晶体的结构、组成和性质 - 晶>>

内容概要

本书详细阐述无机晶体的结构特征，以及品格能、热膨胀、体模量、硬等物理量的测量方法和理论计算方法；累计大量晶体物理参数结果，并利用介电化学键理论方法估算多种复杂晶体系列的力学参数和热学参数，为全面了解晶体性质提供基础数据。

本书包括基本概念、理论分析、公式推导、数据结果和物理规律，同时还提供一种从结构出发估算晶体力学和热学性能的方法。

本书可供材料科学、理论化学、固体物理和无机化学领域的科研工作者，以及高等学校教师和研究生参考。

书籍目录

前言

第1章 晶体的对称性及其基本概念

- 1.1 晶体的点对称性
- 1.2 对称操作的符号和含义
- 1.3 点群
- 1.4 晶体的晶胞和晶系
- 1.5 布拉维点阵
- 1.6 晶体的平移对称性
- 1.7 晶体的空间群

参考文献

第2章 无机晶体的结构特征和性质

- 2.1 无机晶体的结构分布特征
 - 2.1.1 晶体的空间群分布
 - 2.1.2 晶体的点群分布
- 2.2 稀土无机晶体的结构分析
- 2.3 晶体的结构和性质关系

参考文献

第3章 无机晶体的晶格能

- 3.1 晶格能的实验方法
- 3.2 晶格能的理论计算方法
 - 3.2.1 Born-Landé方程
 - 3.2.2 Born-Mayer方程
 - 3.2.3 全面计算方法
 - 3.2.4 Kapustinskii方程
 - 3.2.5 分子体积和晶格能
- 3.3 晶格能的介电化学键理论计算方法
 - 3.3.1 晶体化学键的介电理论
 - 3.3.2 简单晶体晶格能的计算方法
 - 3.3.3 复杂离子晶体晶格能的计算

参考文献

第4章 无机晶体的热膨胀

- 4.1 热膨胀系数的定义
- 4.2 格临爱森系数
- 4.3 热膨胀系数的测定
 - 4.3.1 宏观方法
 - 4.3.2 微观方法
- 4.4 热膨胀系数的计算方法
 - 4.4.1 晶体化学计算方法
 - 4.4.2 理论计算方法
 - 4.4.3 晶体膨胀系数计算的介电理论方法

参考文献

第5章 晶体的弹性模量

- 5.1 体积弹性模量的定义
- 5.2 体模量的实验测定方法
 - 5.2.1 活塞位移法

<<无机晶体的结构、组成和性质 - 晶>>

- 5.2.2 光学干涉法
- 5.2.3 X射线衍射法
- 5.2.4 冲击波法
- 5.2.5 超声波法
- 5.3 体模量的理论计算方法
 - 5.3.1 弹性系数和模量
 - 5.3.2 物态方程计算方法
 - 5.3.3 晶体化学计算方法
 - 5.3.4 晶体结构和化学键参数的计算方法
 - 5.3.5 密度泛函理论计算方法
- 5.4 晶体体模量计算的介电方法
 - 5.4.1 简单晶体体模量的计算公式
 - 5.4.2 LnX (Ln =镧系元素; $\text{X}=\text{N}, \text{P}, \text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}$)
- 晶体的体模量
 - 5.4.3 复杂晶体体模量的计算公式
 - 5.4.4 石榴石型晶体的体模量
- 参考文献
- 第6章 晶体的硬度
 - 6.1 晶体硬度的测量方法
 - 6.1.1 莫氏硬度
 - 6.1.2 维氏硬度
-
- 第7章 复杂晶体的结构、组成和性质
- 第8章 高温超导晶体的结构和性质
- 附录

章节摘录

版权页：插图：体的弹性常数，然后根据特定晶系中弹性系数和体模量之间的关系确定晶体的体模量。

对于其他对称性的晶体，声波速度和弹性系数间也有类似的关系。

Cline等给出六方晶体中波速和弹性系数间的关系。

Farley等给出四方晶体中波速和弹性系数间的关系等。

超声波法是目前唯一能给出单晶弹性系数的测量方法，也是测量体模量最精确的方法之一。

值得注意的是，超声波法给出的是晶体在绝热条件下的弹性系数。

根据测得的弹性系数计算出的是晶体在绝热条件下的体模量和剪切模量，然后将其换算为晶体在等温条件下的体模量值。

此外，超声波法还可以用于多晶样品的测定，此时，需要对样品的密度进行校正。

除了以上介绍的方法，还有超声—光学法、光学散射法X射线漫射法等，这里就不做具体介绍。

总体而言，各种测试方法的测试条件不同，对被测样品的要求以及测量结果的精准度也不同。

除超声波法外，所有方法均需要利用实验测得的P-V数据通过拟合物态方程得到晶体的体模量值。

物态方程的不同选取也会对最终结果产生影响。

5.3 体模量的理论计算方法晶体的任何宏观物理性质必然是晶体微观组成和结构的反映，而晶体是由有序排列的相互作用的质点（原子、离子或分子）组成的。

因此，晶体的宏观物理性质必然取决于组成晶体的质点的性质以及它们之间的相互作用。

理论上，如果我们知道组成晶体的质点间的相互作用势和质点间距离的关系，即势函数，就可以通过定义式（5.1）计算晶体的体模量。

实际上，组成晶体的质点间的相互作用是非常复杂的，主要包括核与核、核与电子、电子与电子间的库仑作用，自旋平行电子之间的交换作用，自旋反平行电子之间的关联作用，原子或分子之间的范德华力以及其他的特殊相互作用等。

编辑推荐

《无机晶体的结构、组成和性质:晶格能、热膨胀、体模量和硬度》为“十一五”国家重点图书出版规划项目。

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>