

固体無機化合物の化学結合

京都大学名誉教授

著 足立 裕彦

◆ 量子材料化学の観点から ◆

B5判・ソフトカバー・フルカラー・320ページ・ISBN 978-4-7827-0842-2 / 定価 27,500円 (本体 25,000円+税)



本書の特徴

無機物質の化学結合についての包括的な教科書。
マテリアルズ・インフォマティクス分野において
中核となる重要なデータ・情報を提供する。

おもな読者対象

新規材料の開発、評価・解析に従事する研究者・入門者。
無機物質の化学結合について学ぶ大学生・大学院生。

おもな内容

先端的な材料を含む数多くの固体無機化合物を、元素・化合物・結晶構造で分類。
量子化学計算から得られるイオン性(正味電荷)や共有結合性(有効結合次数)、
電子構造、電子雲、共有結合構造など、定量的なデータに基づき系統的に解説。
それぞれの化学結合の特徴を明らかにする。

その他の情報



CONTENTS

序 化学結合論

- 1 序論
- 2 化学結合論
- 3 イオン性、共有結合性以外の評価
- 4 電子状態計算に用いたモデル

元素編

- 1 金属元素
- 2 α -菱面体ホウ素
- 3 ダイヤモンド型元素
- 4 グラファイト
- 5 リン (P)
- 6 硫黄 (S)
- 7 砒素 (As)
- 8 金属セレン (Se)

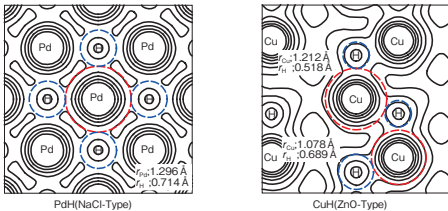
化合物編

- 1 金属水素化物
- 2 金属ホウ化物
- 3 金属炭化物
- 4 金属窒化物
- 5 金属酸化物
- 6 金属ハロゲン化物
- 7 金属ブクタイト
- 8 金属カルコゲナイド

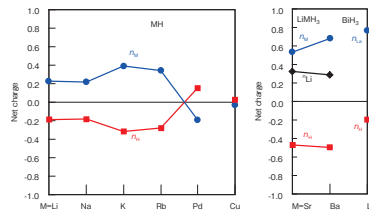
結晶構造編

- 1 NaCl (岩塩) 型化合物
- 2 CsCl 型化合物
- 3 NiAs 型化合物
- 4 ZnS (閃亜鉛鉱) 型化合物
- 5 ZnO (ウルツ鉱) 型化合物
- 6 α -PbO (赤色酸化鉛) 型化合物
- 7 グラファイトと h-BN
- 8 CaF₂(萤石) 型化合物
- 9 FeS₂(黄鉄鉱) 型化合物
- 10 ルチル (TiO₂) 型化合物
- 11 CdI₂型化合物
- 12 CaC₂型化合物
- 13 MgZn₂型金属間化合物
- 14 MgCu₂型金属間化合物
- 15 CuAl₂型化合物
- 16 AlB₂型化合物
- 17 高温クリストパライト型化合物
- 18 Nb₃Sn 型化合物
- 19 Cu₃Au 型化合物
- 20 ReO₃型化合物
- 21 CaB₆型化合物
- 22 α -Al₂O₃(コランダム) 型化合物
- 23 BiF₃型化合物
- 24 La₂O₃(A-希土) 型化合物
- 25 Y₂O₃(C-希土) 型化合物
- 26 Y(OH)₃型ハロゲン化物
- 27 CaTiO₃(ペロブスカイト) 型化合物
- 28 MgAl₂O₄(スピネル) 型化合物

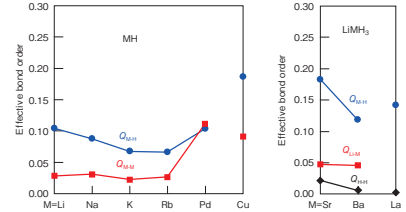
電子密度(電子雲)と電子雲半径



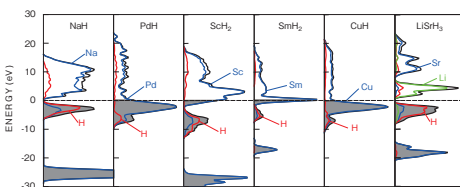
イオン性(正味電荷)



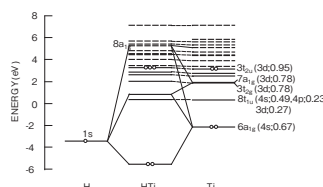
共有結合性(有効結合次数)



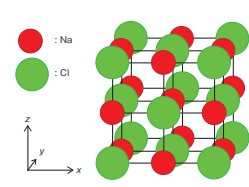
バンド構造



レベル構造



単位格子



三共出版

03-3264-5711

03-3265-5149

東京都千代田区神田神保町3-2

www.sankyoshuppan.co.jp

