

固体無機化合物の化学結合

◆ 量子材料化学の観点から ◆

京都大学名誉教授

著 足立 裕彦

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



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 ヒ素 (As)
- 8 金属セレン (Se)

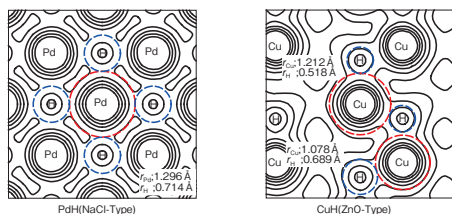
化合物編

- 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

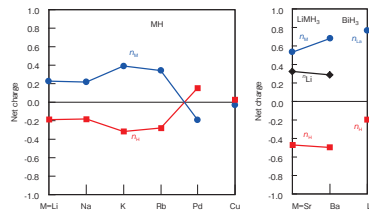
結晶構造編

- 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 CaF_2 (螢石) 型化合物
- 9 FeS_2 (黄鉄鉱) 型化合物
- 10 ルチル (TiO_2) 型化合物
- 11 CdI_2 型化合物
- 12 CaC_2 型化合物
- 13 MgZn_2 型金属間化合物
- 14 MgCu_2 型金属間化合物
- 15 CuAl_2 型化合物
- 16 AlB_2 型化合物
- 17 高温クリストパライト型化合物
- 18 Nb_3Sn 型化合物
- 19 Cu_3Au 型化合物
- 20 ReO_3 型化合物
- 21 CaB_6 型化合物
- 22 α - Al_2O_3 (コランダム) 型化合物
- 23 BiF_3 型化合物
- 24 La_2O_3 (A-希土) 型化合物
- 25 Y_2O_3 (C-希土) 型化合物
- 26 $\text{Y}(\text{OH})_3$ 型ハロゲン化物
- 27 CaTiO_3 (ペロブスカイト) 型化合物
- 28 MgAl_2O_4 (スピネル) 型化合物

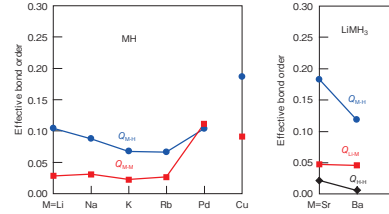
電子密度（電子雲）と電子雲半径



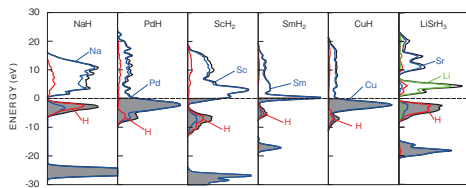
イオン性（正味電荷）



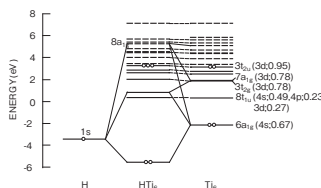
共有結合性（有効結合次数）



バンド構造



レベル構造



単位格子

