



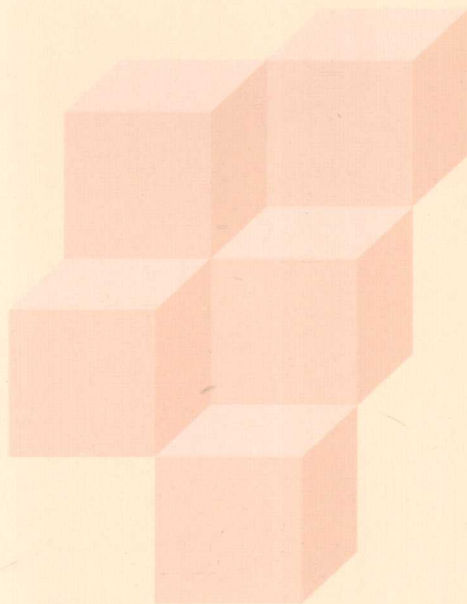
普通高等教育“十一五”国家级规划教材
“十一五”国家重点图书

中国科学技术大学精品教材

结晶化学导论

第3版

► 钱逸泰 编著



中国科学技术大学出版社



中国科学技术大学精品教材

结晶化学导论

JIEJING HUAXUE DAOLUN

第3版

钱逸泰 编著



中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书包括几何结晶学, X 光结晶学和结晶化学三部分。几何结晶学用对称性几何理论讨论了 32 点群和 230 种空间群。X 光结晶学包括 X 射线衍射理论、X 光粉末衍射法及其在无机化学中的应用, 并结合电子显微镜技术研究了纳米材料的形状和物相。结晶化学部分对于无方向性的金属键、离子键、范德瓦尔斯键构成的晶体结构可用球的密堆积模型来描述; 而对于复合化合物的晶体结构则用配位多面体构型来描述, 如钙钛矿八面体配位的超导氧化物, 八面体和四面体复合配位的尖晶石磁性氧化物, 硅氧四面体为骨架的分子筛; 对于多种化学键的如储氢化合物和插层化合物的晶体结构也从结晶化学角度加以描述。

本书适合作高等学校化学、材料学科的本科生教材, 也可供从事相关学科研究人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

结晶化学导论/钱逸泰编著.—3 版. —合肥: 中国科学技术大学出版社, 2008.11
(中国科学技术大学精品教材)

“十一五”国家重点图书

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

安徽省高等学校“十一五”省级规划教材

ISBN 978-7-312-02171-8

I. 结… II. 钱… III. 结晶化学 — 高等学校 — 教材 IV. O74

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 164482 号

中国科学技术大学出版社出版发行

安徽省合肥市金寨路 96 号, 230026

网址 <http://press.ustc.edu.cn>

合肥现代印务有限公司印刷

全国新华书店经销

开本: 710 × 960 1/16 印张: 27 插页: 2 字数: 450 千

1988 年 8 月第 1 版 2005 年 8 月第 3 版 2009 年 1 月第 5 次印刷

印数: 13001—18000 册

定价: 42.00 元



编审委员会

主 任 侯建国

副主任 窦贤康 刘 斌 李晓光

委 员 (按姓氏笔画排序)

方兆本 史济怀 叶向东 伍小平

刘 斌 刘 兢 孙立广 汤书昆

吴 刚 李晓光 李曙光 苏 淳

何世平 陈初升 陈国良 周先意

侯建国 俞书勤 施蕴渝 胡友秋

徐善驾 郭光灿 郭庆祥 钱逸泰

龚 立 程福臻 窦贤康 褚家如

滕脉坤 霍剑青 戴蓓蓓

总 序

2008 年是中国科学技术大学建校五十周年。为了反映五十年来办学理念 and 特色,集中展示学校教材建设的成果,学校决定组织编写出版代表学校教学水平的精品教材系列。在各方的共同努力下,共组织选题 281 种,经过多轮、严格的评审,最后确定 50 种入选精品教材系列。

1958 年学校成立之时,教员大部分都来自中国科学院的各个研究所。作为各个研究所的科研人员,他们到学校后保持了教学的同时又作研究的传统。同时,根据“全院办校,所系结合”的原则,科学院各个研究所在科研第一线工作的杰出科学家也参与学校的教学,为本科生授课,将最新的科研成果融入到教学中。五十年来,外界环境和内在条件都发生了很大变化,但学校以教学为主、教学与科研相结合的方针没有变。正因为坚持了科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合的方针,并形成了优良的传统,才培养出了一批又一批高质量的人才。

学校非常重视基础课教学和专业基础课教学的传统,也是她特别成功的原因之一。当今社会,科技发展突飞猛进、科技成果日新月异,没有扎实的基础知识,很难在科学技术研究中作出重大贡献。建校之初,华罗庚、吴有训、严济慈等老一辈科学家、教育家就身体力行,亲自为本科生讲授基础课。他们以渊博的学识、精湛的讲课艺术、高尚的师德,带出一批又一批杰出的年轻教员,培养了一届又一届优秀学生。这次入选校庆精品教材的绝大部分是本科生基础课或专业基础课的教材,其作者大多直接或间接受到过这些老一辈科学家、教育家的教诲和影响,因此在教材中也贯穿着这些先辈的教育教学理念与科学探索精神。

改革开放之初,学校最先选派青年骨干教师赴西方国家交流、学习,他们在带回先进科学技术的同时,也把西方先进的教育理念、教学方法、教学内容等带回到中国科学技术大学,并以极大的热情进行教学实践,使“科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合”的方针得到进一步

第3版前言

由于材料化学的发展,结晶化学得到充实和提高,结晶化学的读者有所增加。这样我们在1999年出版的《结晶化学导论》第2版的基础上增补、修订了有关内容,成为本书的第3版。具体修改的内容如下:为方便读者理解,我们对 C_{2v} 空间群的具体推导进行了较为详细的描述;从结晶化学角度,对“分子筛”(9.5节)和“夹层化合物”(13.5节)的相关内容进行了扩充;并对“超导氧化物的结晶化学”(第15章)部分的内容进行了调整和增补。此外,书中还穿插进了一些纳米材料的研究内容。

复旦大学龙英才教授对“分子筛”一节提出了宝贵的意见,在此表示真挚的谢意。感谢唐凯斌教授使用本书在中国科学技术大学讲授结晶化学课程,并对再版提出了不少宝贵意见。感谢学校教学主管部门领导的鼓励与支持。

在本书的再版修订过程中,还得到了朱永春、万军喜、张武等同学的大力支持,在此亦表示感谢。

本书虽经修订,但仍难免有错误、不当之处,希望读者在使用本书过程中批评指正。

钱逸泰

2005年6月于中国科学技术大学

第 1 版前言

结晶化学是研究晶体结构规律,并通过对晶体结构的理解来探索晶体性质的一门学科。

由于化学系的学生毕业后从事固体材料方面研究工作的逐年增加,因此自1963年以来中国科学技术大学化学系增设了结晶化学课程。它包括几何结晶学、X光结晶学和结晶化学三部分。本书在几何结晶学部分着重论述了空间群理论;在X光结晶学部分重点介绍了X光粉末法及其在无机固体化学中的应用;在结晶化学部分,对于离子键和共价键型的化合物,以配位多面体的类型及其相互连接方式来对它们进行分类。作为补充,对于化学键的本质也从结晶化学在这个传统领域中取得的成就的角度来描述。

我们之所以对晶体结构如此关心,主要是晶体有着种种有用的性质,同时要继续发现新的晶体结构,开发其对科学或生活有用的性质。因此,本书在描述各种几何结构的同时,对近年来材料科学的成就,如超导材料、激光材料、非线性光学材料、铁电材料、储氢材料等也从结晶化学的观点出发来加以论述。这些都穿插在各有关章节中。

在本书的编写过程中,曾得到了傅佩珍、程瑞鹏、黄允兰和王俊新等同志的大力帮助。刘凡镇副教授和陈祖耀副教授也提出了一些宝贵的意见,并不断给予鼓励。

1963年中国科学院化学所傅亨教授首次在中国科学技术大学主讲了结晶化学课程。作者在辅导该课程中取得了不少教益,在此也表示感谢。

钱逸泰

1987年6月

目 次

总序	(i)
第 3 版前言	(iii)
第 2 版前言	(iv)
第 1 版前言	(v)
 第 1 章 晶体及其本质	(1)
1.1 晶体	(1)
1.1.1 晶体概念的发展	(1)
1.1.2 同质多象	(3)
1.2 晶体的基本特点	(4)
1.2.1 各向异性	(4)
1.2.2 均匀性	(6)
1.3 点阵与点阵结构	(7)
1.3.1 点阵与点阵结构的概念	(7)
1.3.2 点阵和平移群	(8)
1.3.3 格子和晶胞	(9)
1.4 实际晶体	(11)
1.4.1 单晶体与多晶体	(11)
1.4.2 实际晶体与理想晶体	(12)
1.4.3 二面角守恒定律	(12)
1.4.4 氯化钠晶体的抗拉强度	(13)
1.4.5 液晶	(14)
第 2 章 晶体的宏观对称性	(15)
2.1 对称性概论	(15)
2.1.1 基本概念	(16)
2.1.2 宏观对称元素	(16)
2.1.3 对称元素和点阵的几何配置	(21)
2.1.4 对称性定律	(22)
2.2 对称元素组合原理	(22)

3.3.3 平移和斜交反映面的给合	(56)
3.3.4 旋转轴与垂直平移的组合	(56)
3.3.5 旋转轴与斜交平移的组合	(57)
3.4 晶体的 230 种空间群	(57)
3.4.1 微观观察下和宏观观察下的晶体	(57)
3.4.2 空间群与点群的同形关系	(58)
3.4.3 空间群的符号	(58)
3.4.4 与点群 C_{2v} 同形的空间群	(59)
3.4.5 与 C_{2v} 同形的空间群的投影图表示	(65)
3.5 等效点系	(76)
3.5.1 等效点系	(76)
3.5.2 等效点系的符号	(77)
3.6 几何结晶学总结	(78)
3.6.1 对称性和几何度量	(78)
3.6.2 对称性的重要性	(79)
3.6.3 几何结晶学总结	(79)
第 4 章 X 光与晶体	(81)
4.1 劳埃方程	(81)
4.1.1 晶体作为 X 光的衍射光栅	(81)
4.1.2 劳埃方程	(82)
4.1.3 X 光照相法	(83)
4.2 布拉格方程	(83)
4.2.1 离原点第一个点阵平面的方程	(83)
4.2.2 布拉格方程	(84)
4.2.3 面间距公式	(86)
4.3 第一次 X 光结构分析	(87)
4.4 衍射强度和晶胞中的原子分布	(90)
4.4.1 原子散射因子	(90)
4.4.2 结构因子	(90)
4.4.3 结构因子的计算	(93)
4.4.4 倍数因子	(96)
4.4.5 偏振因子和洛伦兹因子	(97)
4.4.6 衍射强度公式	(98)
4.5 倒易点阵	(98)

6.1.1	原理	(142)
6.1.2	弗里德尔对称性	(143)
6.1.3	应用	(144)
6.2	转动照相和魏森堡照相	(145)
6.2.1	转动照相原理	(145)
6.2.2	转动照相的缺点	(147)
6.2.3	魏森堡照相原理	(147)
6.2.4	应用	(148)
6.3	旋进照相	(149)
6.3.1	转动照相的倒易点阵解释	(149)
6.3.2	倒易点阵照相法—旋进照相法	(150)
6.4	晶体中电子云密度的空间分布	(152)
6.4.1	晶体中电子云密度的分布	(152)
6.4.2	电子云密度投影图	(153)
6.5	重原子法	(154)
6.5.1	重原子原理	(154)
6.5.2	重原子位置的确定	(156)
6.5.3	测定实例: 肽花腈铂($\text{PtC}_{32}\text{H}_{16}\text{N}_8$)结构分析	(156)
6.6	电子衍射和中子衍射	(159)
6.6.1	电子衍射	(159)
6.6.2	中子衍射	(160)
6.6.3	中子衍射的用途	(161)
第7章	结晶化学概论	(164)
7.1	等径球的密堆积	(164)
7.1.1	球的六方 A_3 和立方 A_1 的最紧密堆积	(164)
7.1.2	空间利用率	(166)
7.1.3	多层堆积	(167)
7.1.4	原子半径	(167)
7.2	不等径球的密堆积	(168)
7.2.1	最密堆积中的空隙类型	(168)
7.2.2	离子晶体的堆积	(171)
7.2.3	离子半径比对结构的影响	(171)
7.2.4	离子半径的求解	(172)
7.3	分子的堆积	(176)

8.5.2	化学键中离子键和共价键成分	(213)
8.5.3	离子键和共价键的相互过渡	(214)
第9章	四面体配位的结晶化学	(218)
9.1	孤立基团的稳定性	(218)
9.1.1	离子的屏蔽效应	(218)
9.1.2	络离子的稳定性	(220)
9.2	ZnS 的结构	(220)
9.2.1	ZnS 的两种结构	(220)
9.2.2	不定比性和无序结构	(221)
9.2.3	衍生结构(有序超结构)	(221)
9.2.4	半导体的结晶化学	(223)
9.3	SO ₃ 和 P ₂ O ₅ 的晶体结构	(224)
9.3.1	SO ₃ 的结构和物性	(224)
9.3.2	P ₂ O ₅ 的结构和物性	(225)
9.4	硅酸盐	(226)
9.4.1	硅酸盐的结构特征	(226)
9.4.2	硅酸盐的分类	(227)
9.4.3	硅酸盐的结晶化学	(231)
9.5	分子筛	(233)
9.5.1	分子筛的结构特征	(233)
9.5.2	典型硅(铝)酸盐沸石分子筛的结构类型	(235)
9.5.3	磷酸铝分子筛的结构	(245)
第10章	八面体配位的结晶化学	(249)
10.1	钙钛矿型结构	(249)
10.1.1	钙钛矿(CaTiO ₃)型结构	(249)
10.1.2	压电晶体、热电晶体和铁电晶体	(250)
10.1.3	钙钛矿型复合氧化物的超导电性	(253)
10.2	ReO ₃ 和相关结构	(255)
10.2.1	ReO ₃ 结构	(255)
10.2.2	钨青铜(A _x WO ₃)结构及其超导电性	(255)
10.2.3	切变化合物	(258)
10.3	CdI ₂ 和 CdCl ₂ 型结构	(259)
10.3.1	CdI ₂ 和 CdCl ₂ 结构	(259)
10.3.2	多层堆积和超结构	(260)

