

复杂晶体点阵能的计算方法

高发明,张思远

中国科学院长春应用化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 我们在考虑了晶体中近邻正、负离子的共价行为的基础上,提出了晶体点阵能的计算公式,并引进了离子有效价态的概念和共价能计算的经验表达式,把二元离子晶体点阵能的计算推广到一般极性共价晶体和其他复杂晶体. 计算结果与实验结果符合得很好.
关键词 [计算方法](#) [晶体](#) [二元化合物](#) [晶格能](#)

分类号 [074](#)

Calculation method of lattice energy on complex crystals

GAO FAMING,ZHANG SIYUAN

Abstract

Key words [COMPUTATIONAL METHOD](#) [CRYSTALS](#) [BINARY COMPOUND](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“计算方法”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [高发明](#)

· [张思远](#)