第一图书网, tushu007.com

<<单晶结构分析原理与实践>>

图书基本信息

书名：<<单晶结构分析原理与实践>>

13位ISBN编号：9787030192165

10位ISBN编号：7030192168

出版时间：2007-8

出版时间：科学

作者：陈小明，蔡继文编

页数：228

字数：287000

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

内容概要

《单晶结构分析原理与实践(第2版)》主要介绍了X射线晶体衍射的基本原理，晶体的培养与衍射数据的收集，晶体结构解析与精修的基本概念、结果的表达，有关的晶体学数据库和软件资源，结构解析的实际例子及常用软件的使用方法等。
本书结合作者多年从事晶体结构分析所积累的经验，总结了结构解析过程中常见的问题与解决方法，并提供了最新的有关文献资料。
作者陈小明教授和蔡继文博士对第一版进行了增删、修改，旨在进一步提高理论基础的易读性和实用性，突出与实践密切相关的内容，对面探衍射仪的操作、数据处理等内容做了适当的增加，提供了更多有助于读者解决结构解析和精修过程中容易遇到问题的内容和实例。

《单晶结构分析原理与实践(第2版)》可以作为涉及晶体结构分析工作的化学工作者，尤其是合成、材料、晶体工程和超分子化学等学科的研究生和科研工作者的教材或参考书。

作者简介

陈小明
教授，1986年毕业于中山大学化学系，1992年获香港中文大学博士学位。
1992年到中山大学任教，1996年获国家杰出青年科学基金资助，1999年被聘为长江学者计划特聘教授。
现任中国晶体学会常务理事、中国化学会理事和中国稀土学会理事，Crystal Growth. &Design专题编辑，ChemCommun、Eur. J. Inorg. Chem. 和Polyhedron顾委，《无机化学》副主编以及《结构化学》等刊物编委。
从事功能金属配合物合成化学与晶体工程研究，在JACS、Angew、Chem和Acc. Chem. Res. 等杂志上发表论文200多篇。
曾获两项省部级自然科学奖一等奖及“求是杰出青年学者奖”。

蔡继文
教授，博士生导师，1987年毕业于中山大学化学系，1994年获美国休斯顿大学化学系博士学位，1997年到中山大学工作，主要研究领域为结构化学与结构生物学，代表性研究工作发表在Coordination Chemistry Reviews(2004)。

书籍目录

第二版前言
第一版前言
符号说明
第1章 引言
1.1 晶体的特征
1.2 单晶结构分析简史
1.3 晶体结构分析的重要性
1.4 结构分析的过程
参考文献
第2章 衍射几何与结构因子
2.1 X射线与衍射几何
2.2 衍射强度与结构因子
参考文献
第3章 晶体对称性与空间群
3.1 晶格
3.2 十四种布喇菲晶格
3.3 晶体的对称性
3.4 空间群
参考文献
第4章 晶体培养与衍射实验
4.1 单晶的培养
4.2 晶体的挑选与安置
4.3 衍射仪基本结构与X射线的种类
4.4 传统四圆衍射仪与数据收集
4.5 面探测器衍射仪与数据收集
4.6 数据的还原与校正
4.7 吸收校正
4.8 衍射数据质量的检查与评估
4.9 其他衍射方法
参考文献
第5章 晶体结构解析
5.1 结构解析的过程与相角问题
5.2 傅里叶合成
5.3 帕特森方法
5.4 直接法
5.5 结构解析中的若干问题
参考文献
第6章 结构精修
6.1 结构精修与最小二乘法
6.2 权重方案与残差因子
6.3 精修技巧
6.4 结构精修中的若干问题
6.5 结构精修结果的检查
参考文献
第7章 晶体结构的表达

7.1 晶胞参数与分子式
7.2 分子几何
7.3 分子间的作用
7.4 结构图
7.5 结果数据表
7.6 模拟粉末衍射花样
7.7 电子密度
参考文献
第8章 晶体学信息文件、数据库与程序资源
8.1 CIF的定义与产生方法
8.2 CIF格式与检查
8.3 CIF实例
8.4 晶体学数据库
8.5 一些单晶结构分析及绘图程序简介
参考文献
第9章 结构解析的实际例子
9.1 经典配合物与空间群P1
9.2 有机天然产物绝对结构(构型)的确定
9.3 配位聚合物一空间群Cc与C2／c
9.4 外消旋化合物与手性空间群
9.5 含有多个分子的独立单元
9.6 晶体结构与氢键及其表达
9.7 具有孔洞结构的配位聚合物
9.8 非缺面孪晶
9.9 用铜靶光源确定不含重原子的有机物绝对构型
9.10 用铜靶光源收集金属一有机物晶体的衍射数据
9.11 超低温晶体衍射数据的收集
9.12 甜味蛋白的晶体结构
参考文献
第10章 SHELXTL程序与结构解析和精修
10.1 SHELXTL主要子程序简介
10.2 XPREP
10.3 XS
10.4 XP：结构模型的检查和修改
10.5 XL
10.6 XP：画图
10.7 XCIF
参考文献
第11章 无序结构精修实例
11.1 无序结构精修基本原理与方法
11.2 高氯酸根离子
11.3 环戊二烯基
11.4 混合配体的无序
11.5 苯环与烷基链的无序
11.6 DMF分子的两重无序
11.7 金属离子掺杂引起的无序
参考文献

索引

第一图书网, tushu007.com

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