

<<晶体结构精修>>

图书基本信息

书名：<<晶体结构精修>>

13位ISBN编号：9787040288803

10位ISBN编号：704028880X

出版时间：2010-3

出版时间：高等教育出版社

作者：（美）马勒 等著，陈昊鸿 译

页数：239

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>

## &lt;&lt;晶体结构精修&gt;&gt;

## 前言

SHELX简史5000行FORTRAN程序代码构成的SHIELX-76起源于1970年左右剑桥大学ICL Titan计算机被IBM-370计算机代替的时候。

早期我尝试用Titan Auto-code（一种简单却有效的，比现代高级程序语言更偏向汇编语言的编程语言）编写程序，而随着IBM计算机的到来，出现了两个主要的革新：FOR FRAN编译器和穿孔卡片。我被迫将有关晶体学最小二乘精修的首个作品N0sQuAR：ES程序用另一种程序语言重写，而这是完善它的一个好机会。

不过由于我懒于阅读FORTRAN手册或者参加相关培训，所以我用FORTRAN一个非常简单的子集重写了这个程序，得到了原Titan Autocode代码编写的程序的一个“古怪”类似物，并且取消了不利于移植到别的计算机的性能，以便我不用再为了运行于其他计算机而重写这个程序。

这种做法的好处是代码高效，这点对当时主流计算机有限的计算和存取速度（约是现代计算机的万分之一）来说是非常重要的。

实际上SHELX-76在几乎所有的现代FORTRAN-95编译器中仍然能够编译并且运行正确。

当时我自认是属于喜欢应用各种物理方法的无机化学家。

我的博士论文题目就是《无机氢化物的NMR研究》（导师Evelyn Ebsworth）。

当我1978年进入格奥格—奥古斯特—哥廷根大学（即哥廷根大学）后，我发现我的德国同事们比起我来是多么更擅长于“烹饪”（制备化学）。

我觉得自己围绕晶体结构解析展开工作将更好，因为当时他们迫切需要表征他们自己合成的所有化合物。

20世纪60年代，我们擅长使用的结构确定方法之一是气相电子衍射，它可以用于确定相当不稳定的，具有与空气接触就爆炸的性质的-SIH，衍生物的结构。

使用这种方法需要先在剑桥大学合成样品并带到格拉斯哥大学，再到曼彻斯特的UMIST。

在那里Durward cruickshank拥有国内唯一的可运转的气相电子衍射仪器。

在一次访问中，我向Durward提到我将需要做些x射线晶体学的工作，因为不是我们所有的样品都具有足够的挥发性从而可以在气相中确定结构的。

并且提到我找到了一台x射线发生器和一台魏森堡相机，但是仍然需要为Fitan电脑写一个合适的Autocode程序来分析得到的数据。

Durward非常友善地提供了一些关于最小二乘精修的意见。

## <<晶体结构精修>>

### 内容概要

本书详细介绍了晶体结构精修中的常见问题及其处理技巧，采用具体示例的方式加以说明。

本书使用晶体学领域内享有盛誉并广泛使用的精修软件——SHELXL。

对小分子晶体结构精修中的加氢、原子类型指定、无序、赝对称、孪晶、赝像等方面进行了阐述，讨论了小分子晶体结构验证的必要性和手段，同时对蛋白质等生物大分子的精修和结构验证也进行了概述。

书中每个示例的原始数据和各步精修操作的结果文件均附于随书光盘，方便读者自行练习使用。

本书有助于促进对晶体结构精修知识的理解和运用，掌握先进的结构解析工具，提高晶体结构测定的技术水平。

本书可以作为具有初步x射线晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者的进修教材，也可以作为相关研究人员的参考书。

## <<晶体结构精修>>

### 作者简介

Peter Muller, 在德国哥廷根大学George Sheldrick教授 (SHELX 程序包的作者) 课题组获得了化学与晶体学硕士和博士学位, 目前是美国麻省理工学院化学系X射线衍射室主任和首席研究员。

长期教授基础晶体学和高级晶体学 (包括理论和实验) 课程。

另外, 近几年他还在美国与德国举办过多个结构精修讲习班。

Regine Herbst-Irmer, 著名的孪晶研究专家, 1990年在George Sheldrick教授指导下取得了博士学位。

目前她和Sheldrick一起工作于德国哥廷根大学, 担任晶体学高级讲师并负责师资培训事务。

Anthony L. Spek, 荷兰乌得勒支大学教授, 毕吉伯生物分子研究中心国家单晶服务设施部主任。

多年从事晶体学教学工作, 致力于发展晶体学软件和研究单晶结构自动验证、孪晶、对称性缺失和赝对称等问题, 是广泛用于结构有效性验证的PLATON软件的作者。

## &lt;&lt;晶体结构精修&gt;&gt;

## 书籍目录

1 SHELXL 1.1 SHELX程序包 1.1.1 SHELXTL和其他程序 1.2 SHELXL 1.2.1 程序组成 1.2.2 指令文件name.ins 1.2.3 衍射数据文件name.hkl 1.2.4 SHELXL中的数据合并 1.2.5 连通性表  
2 晶体结构精修 2.1 最小二乘精修 2.1.1 精修应基于F还是F<sup>2</sup>——这会成为问题吗? 2.2 弱数据点和高分辨率截断 2.3 残差因子 2.4 参数 2.5 约束 2.5.1 位置占有率因子 2.5.2 特殊位置约束 2.5.3 刚性基团约束 2.5.4 浮动原点约束 2.5.5 氢原子 2.5.6 SHELXL中的约束用法 2.6 限制 2.6.1 几何限制 2.6.2 位移参数的限制 2.6.3 其他限制 2.7 SHELXL中的自由变量 2.8 结果.....  
3 氢原子 4 原子类型的指定 5 无序 6 赝对称 7 孪晶 8 赝像 9 结构验证 10 蛋白质精修 11 蛋白质结构的(交叉)验证 12 总论参考文献进阶读物索引光盘文件勘误说明

## &lt;&lt;晶体结构精修&gt;&gt;

## 章节摘录

插图：3.3 在SHELXL中定位氢原子实际SHELXL精修中x-H键长和H-x-H键角一般通过约束条件指定。SHELXL简化了氢原子位置的确定：除了可以生成正确的氢原子位置外，HFIX指令还能对任何指定的c-H以及其他大多数的X-H产生各种必要的约束条件。

HFIX指令的一般语法如下：HFIX mn atomnamesm表示几何位置，确定了所要生成的氢原子数目。n则指明程序如何处理氢原子或者原子，后者由原子名称（atomnames）指定。

HFIX可以计算合适的氢原子位置，生成这些氢原子并且正确地加入结合这些待定氢原子一起进行的精修所必需的AFIX约束（关于AFIX指令的全面介绍参见第二章）。

在.res文件中，新加入的氢原子位于“AFIX mn”行之后，并且其后紧跟着“AFIX 0”行代表这个氢原子区段的结束。

新加入的氢原子的各向同性u值由程序自动设为1.2（对甲基则是1.5）。

SHELXL可以根据.ins文件指定的温度（温度值放在TEMP命令后，以摄氏度为单位）确定合适的x-H键长。

因此指定晶体数据收集的温度十分重要。

在大多数情况下，n取值为3，用于形容“骑式模型”。

这种模型将氢原子看作骑马的人，而非氢原子就是那匹“马”。

当精修中非氢原子移动时，氢原子相应跟着移动，好比当马走路的时候，马上的人也跟着马一起移动（假设这个人不会从这匹动物的身上掉下来）。

其他经常用于氢原子精修的n值是7和8，两者也表示骑式模型，但是具有额外的自由度（参见下面介绍）。

3.3.1 HFIX指令中最常用的m和n取值列表关于AFIX限制中m和n所有允许取值的有效组合，SHELX用户手册给出了全面、清晰并完整的介绍。

下面仅罗列了借助HFIX指令生成氢原子的m和n取值中最常见的九种组合，不算是对这类组合的完整介绍。

HFIX 13 理想叔氢（C-H）基团，所有X-C-H角度相等，随后以骑式模型（riding model）精修。

HFIX 23 理想仲氢（CH<sub>2</sub>）基团，所有X-C-H和Y-c-H的角度相等，以骑式模型精修。

H-C-H根据相应正四面体进行计算，如果X-C-Y偏离正四面体分布，该角度将被加宽。

HFIX 33 理想正四面体分布的CH<sub>3</sub>基团，以骑式模型精修。

## <<晶体结构精修>>

### 编辑推荐

《晶体结构精修:晶体学者的SHELXL软件指南》编辑推荐：SHELXL是目前国际上使用最广泛的结构精修程序，不仅功能比较强大，而且使用比较方便。

《晶体结构精修:晶体学者的SHELXL软件指南)》既是一本面向晶体学者的SHELXL软件指南，也是一本教科书。

它涵盖了大量晶体结构精修中可能遇到的难题，一步一步展示晶体结构精修的方方面面，并通过示例文件和详细讲解说明问题、阐述机理。

随书光盘提供了重现这些精修过程需要的所有文件，方便读者自行练习和对照。

对于具有初步 x 射线晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者，《晶体结构精修:晶体学者的SHELXL软件指南》是一本非常优秀的教材；即使对于多年从事晶体结构解析的专家，《晶体结构精修:晶体学者的SHELXL软件指南》也有很好的参考价值。

<<晶体结构精修>>

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>