

《粉末衍射法测定晶体结构（第二版）（上下册）



书籍信息

版次：31

页数：

字数：

印刷时间：2017年03月02日

开本：128开

纸张：胶版纸

包装：平装-胶订

是否套装：否

国际标准书号ISBN：9787030304735

丛书名：现代物理基础丛书·典藏版

编辑推荐

导语_点评_推荐词

内容简介

《现代物理基础丛书·典藏版：粉末衍射法测定晶体结构（上册）
X射线衍射结构晶体学基础（第二版）》：

晶体结构是了解固体材料性质的重要基础，X射线粉末衍射法是提供有关晶体结构信息的主要方法之一。本书除了扼要介绍X射线衍射的晶体学基础、化合物结构的晶体学基本概念、X射线粉末衍射的实验方法，以及衍射线的位置和峰形及强度的测定外，还比较系统全面地论述了粉末衍射图谱的指标化、点阵常数的精确测量、粉末衍射测定新型化合物晶体结构的各种方法及里特沃尔德（Rietveld）法全谱拟合修正晶体结构、固溶体类型与超结构的测定，以及键价理论在离子晶体结构分析中的应用。重点阐述粉末衍射结构分析从头计算方法。

本书可供从事X射线晶体学和材料科学的科技工作者，以及高等院校有关专业的师生参考。

《现代物理基础丛书·典藏版：粉末衍射法测定晶体结构（下册）
X射线衍射在材料科学中的应用（第二版）》：

[显示全部信息](#)

目录

《现代物理基础丛书·典藏版：粉末衍射法测定晶体结构（上册）
X射线衍射结构晶体学基础（第二版）》：

第二版前言

第一版序

第一版前言

第一章 X射线衍射的晶体学基础

§1.1 晶体的基本特征

§1.2 晶体的宏观对称元素

1.2.1 对称中心

1.2.2 对称面 (反映面)

1.2.3 旋转对称轴 (对称轴)

1.2.4 五次和高于六次的旋转对称轴不可能存在

1.2.5 旋转反演对称轴

1.2.6 旋转反映轴

1.2.7 宏观对称元素的图示

§1.3 宏观对称元素的组合定理

§1.4 32个晶体类型、点群和晶系

1.4.1 32个晶体类型的推导

1.4.2 点群

1.4.3 七种晶系

§1.5 点阵、晶面、晶向和晶带

1.5.1 空间点阵

1.5.2 阵点平面指数

1.5.3 空间点阵的阵点直线方向指数

1.5.4 晶带与晶带轴

1.5.5 晶棱与晶棱指数

1.5.6 晶面指数与晶棱指数的相互关系

1.5.7 同一晶带各个晶面的指数

§1.6 倒易点阵

1.6.1 倒易点阵概念

1.6.2 晶体正空间和倒易空间晶胞基本参数的关系

1.6.3 晶向与晶向、晶面与晶面、晶向与晶面间夹角的计算

§1.7 14种布拉维 (Bravais) 点阵

§1.8 微观空间对称元素的组合

1.8.1 晶体的微观对称元素

1.8.2 微观空间对称元素与周期平移的组合

1.8.3 微观空间对称元素之间的组合

1.8.4 微观对称元素与非初基平移的组合

§1.9 空间群

1.9.1 坐标系原点的选择

1.9.2 230个空间群

1.9.3 120个X射线衍射群

1.9.4 国际表中空间群应用的简要说明

§1.10 X射线衍射方程

1.10.1 布拉格 (Bragg) 衍射方程式

1.10.2 晶面间距与晶体点阵常数的关系

1.10.3 晶面间距与晶体倒易点阵晶胞参数的关系

参考文献

第二章 化合物结构的晶体化学基础

§ 2.1 化合物分类和晶体结构类型概述

2.1.1 二元和多元复杂化合物的组分分类

2.1.2 晶体结构类型的分类

2.1.3 晶体所属空间群分布的统计

§ 2.2 密堆积理论和元素的晶体结构

2.2.1 圆球密堆积在晶体结构中的意义

2.2.2 等径圆球六角和立方密堆积

2.2.3 圆球密堆积排列的空隙类型

2.2.4 多层密堆积的表示方法

2.2.5 圆球密堆积排列的点群和空间群

2.2.6 元素的晶体结构

§ 2.3 元素的原子半径、离子半径和共价半径

2.3.1 元素的原子半径

2.3.2 元素的离子半径

2.3.3 元素的共价半径

§ 2.4 原子的电负性、电离能和电子亲合能

2.4.1 原子的电负性

2.4.2 原子的电离能

.....

第三章 X射线粉末衍射实验技术

第四章 粉末衍射法的峰形、位置和强度

《现代物理基础丛书·典藏版：粉末衍射法测定晶体结构（下册）

X射线衍射在材料科学中的应用（第二版）》：

第二版前言

第一版序

第一版前言

第五章 粉末衍射图谱的指标化

§ 5.1 粉末衍射数据的唯一性、完备性和准确性

§ 5.2 新相所属晶系的确定

5.2.1 立方晶系

5.2.2 单轴晶系

5.2.3 正交晶系

§ 5.3 立方晶系面指数标定法

5.3.1 \sin^2 （或 d^2 ）比值法

5.3.2 计算尺法

5.3.3 经验判断法

§ 5.4 标定面指数的图解法

- 5.4.1 赫耳·戴维 (Hull-Davey) 图解法
 - 5.4.2 布恩 (Bunn) 图解法
 - 5.4.3 平行线图解法
 - 5.4.4 三线图解法
 - §5.5 标定面指数的解析法
 - 5.5.1 赫西-利普森 (Hesse-Lipson) 解析标定法
 - 5.5.2 伊藤 (Ito) 解析标定法
 - §5.6 标定面指数的计算机程序法
 - 5.6.1 晶面指数尝试法
 - 5.6.2 晶带分析法
 - 5.6.3 二分法
 - 5.6.4 等原子三线法
 - §5.7 约化胞
 - 5.7.1 约化胞概念
 - 5.7.2 确定约化胞的方法
 - 5.7.3 约化胞的类型
 - 5.7.4 约化胞变换为标准单胞
 - 5.7.5 约化处理应用实例
 - §5.8 齐次轴与德莱尼 (Delaunay) 约化
 - 5.8.1 齐次轴
 - 5.8.2 晶胞的齐次轴表示法
 - 5.8.3 德莱尼约化法
 - 5.8.4 24种德莱尼约化四面体
 - 5.8.5 德莱尼约化法应用实例
 - §5.9 指标化结果正确性的判据
 - 5.9.1 德沃尔夫 (deWolff) 的品质因数判据
 - 5.9.2 史密斯 (Smith) 的FN或F20判据
 - 5.9.3 面间距差值最小判据
 - 5.9.4 密度判据
 - 5.9.5 衍射线数目与单胞体积判据
- 参考文献

第六章 晶体点阵常数的精确测量

- §6.1 精确测定晶体点阵常数的意义
- 6.1.1 点阵常数与固态物质键能的关系
- 6.1.2 测定固态物质的压缩系数和膨胀系数
- 6.1.3 测定相图的固溶线
- 6.1.4 测定热力学二级相变温度
- 6.1.5 固溶体化学成分分析
- 6.1.6 判别固溶体的类型
- §6.2 德拜-谢乐衍射几何系统误差的产生根源和消除方法
- 6.2.1 试样的偏心

- 6.2.2 试样的吸收
- 6.2.3 X射线垂直方向的发散度
- 6.2.4 X射线的折射
- 6.2.5 衍射照片的伸缩和照相机半径加工不准确
- 6.2.6 衍射仪记录系统的滞后性
- 6.2.7 衍射背底的影响
- §6.3 西曼-玻林准聚焦对称背反射型衍射几何的系统误差和消除方法
- 6.3.1 照相胶片伸缩
- 6.3.2 照相机半径或刀边偏差

.....

第七章 X射线粉末衍射法测定新相的晶体结构

第八章 固溶体与超结构

第九章 晶体结构修正和键价理论

汉英对照主题词索引

化合物索引

前言

本书结合著者多年来从事X射线粉末衍射工作的实践经验和积累编著而成，主要阐述X射线粉末衍射图谱的指标化、点阵常数的精确测量、粉末衍射法测定新物相的晶体结构的各种方法，特别是根据粉末衍射数据从头算方法，以及里特沃尔德（Rietveld）法全谱拟合修正晶体结构等。为广大从事晶体学和材料科学的科技工作者、教师、研究生和高年级大学生提供参考。

本书第一版于2003年4月由科学出版社出版，面世后受到有关科技工作者的欢迎，早已脱销。在中国科学院物理研究所饶光辉研究员、陈小龙研究员、中国物理学会X射线衍射专业委员会和相图专业委员会的大力支持以及科学出版社刘延辉博士的推动下，本书得以再版。再版书主要作了如下更改：

- 1.改正了原书第一版中一些书写、印刷的疏漏和错误。
- 2.对个别表述不清部分，作了文字的修改和补充。
- 3.增添了部分国内近期利用X射线粉末数据、单晶结构分析方法从头算测定新物相晶体结构的研究结果，以及对非等效本征重叠的衍射强度合理分配方法的探讨。
- 4.增加了化合物的索引，并充实了主题词的索引内容。

[显示全部信息](#)

媒体评论

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www.tushupdf.com](http://www.tushupdf.com)