

图书基本信息

书名：<<粉末衍射法测定晶体结构（套装上下册）>>

13位ISBN编号：9787030304735

10位ISBN编号：703030473X

出版时间：2011-3

出版时间：科学出版社

作者：梁敬魁

页数：全2册

字数：832000

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>

## <<粉末衍射法测定晶体结构 ( 套装上下)>>

### 内容概要

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、化合物结构的晶体化学基本概念、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。

## 作者简介

梁敬魁，中国科学院院士。

中国科学院物理研究所和北京凝聚态物理国家实验室(筹)研究员，凝聚态物理和物理化学专业博士生导师。

1955年毕业于厦门大学化学系物理化学专业。

1960年在苏联科学院巴依科夫冶金研究所金属合金热化学和晶体化学专业研究生毕业。

获苏联科学院技术科学副博士学位。

曾任中国科学院福建物质结构研究所所长，中国科学院化学部常委，中国晶体学会副理事长，粉末衍射专业委员会主任、名誉主任，国际晶体学联合会仪器委员会委员，中国物理学会常务理事。

出版工作委员会主任、X射线衍射专业委员会副主任、主任、名誉主任，相图专业委员会副主任、名誉主任，中国化学会常务理事，北京理化分析测试技术学会副理事长，X射线衍射分会主任，福州结构化学国家重点实验室学术委员会副主任、主任，北京动态与稳态分子结构国家重点实验室学术委员会副主任，北京稀土材料化学及应用国家重点实验室学术委员会副主任，以及中国科学技术大学等多所院校兼职教授。

现任中国科学院物理研究所和北京凝聚态物理国家实验室(筹)学术委员会副主任，Chinese Physics 和《物理学报》副主编，《中国稀土学报》常务编委，中国科学院福建物质结构研究所兼职研究员和博士生导师。

长期在晶体结构化学、材料科学和凝聚态物理三个学科的交叉领域从事基础和应用基础研究。

主要应用X射线衍射和热学分析，并辅以物理性能测试等方法，研究无机固体功能材料(包括高 $T_c$ 氧化物超导材料、激光非线性光学材料、稀土储氢和磁性材料等)的合成、相关性和晶体结构，以及相图在晶体生长中的应用。

出色完成属首创的“地下核试验测温装置”的研制。

培养了一批优秀的研究生。

发表(含合作)论文和综述等500余篇和四部著作：

《相图和相结构》(上下册)、《高 $T_c$ 氧化超导体系相关性和晶体结构》(获1995年全国优秀图书二等奖)、

《粉末衍射法测定晶体结构》(上下册)、

《新型超导体系相关性和晶体结构》。

主持的科研工作获中国科学院重大科技成果奖(第一完成人)、国家自然科学基金三等奖(第一完成人)、北京市科学技术(基)一等奖(第一完成人)各一项，以及多项中国科学院科技进步二等奖、三等奖和科学出版社优秀作者奖等。

曾被评为中国科学院先进工作者和优秀共产党员、中国科学院优秀研究生指导教师和杰出贡献教师、卢嘉锡科学教育基金会优秀导师奖等，1999年获何梁何利基金科学与技术进步奖。

## 书籍目录

## 粉末衍射法测定晶体结构 ( 第二版 ) ( 上册 )

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乎移的组合

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、电离能和电子亲和能

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

粉末衍射法测定晶体结构 ( 第二版 ) ( 下册 )

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  $\sin^2 \theta$  (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

.....

第六章 晶体点阵常数的精确测量

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 日体结构修正和键价理论

汉英对照主题词索引

化合式索引

《现代物理基础丛书》已出版书目

章节摘录

插图：任何物质均由原子、离子或分子所组成。

晶体有别于非晶物质，它的内部所含原子、离子或分子具有严格的三维有规则的周期性排列。

在不同物质的晶体内，原子、离子或分子的排列方式是各不相同和丰富多样的，因此呈现出各种不同的性质。

但千差万别的不同晶体都有一个共同基本点，这就是它们内部都具有在三维空间排列上的周期性，即一定数量和一定种类的原子、离子、分子或分子集团在空间排列上每隔一定距离重复出现，呈现三维空间的周期性。

这是晶体与其他非晶形态物质的最主要区别，也是晶体具有各种不同特性的根本原因。

晶体除了内部物质点作周期性的排列外，还具有其他一些基本性质。

例如：1.对称性晶体的宏观外形或内部微观结构都具有自身特有的对称性。

晶体对称性是由其周期性所决定的。

2.均一性由于在晶体结构中任一物质点在三维空间都是周期性重复，因而在晶体的不同部位取足够大的一块体积时，它们内部物质点的性质和排列方式都是相同的，其性质也是相同的。

3.各向异性在晶体结构中，各物质点在不同的方向的排列方式是不同的，因而在不同的方向上，其性质不相同。

例如石墨在平行于 $x$ -轴和垂直于 $z$ -轴的物理和力学性能存在很大的差别。

4.封闭性晶体的封闭性指晶体具有自发地形成封闭的几何多面体外形。

并以此范围封闭着晶体本身。

氯化钠在理想的生长环境，它可以结晶成一个完整无色透明的立方体，这种立方体由六个正方平面互相连接组成的有限封闭空间。

晶体表面的每一个平面称为晶面，两个晶面之间所连接的直线称为晶棱，由多个晶面组成的有限封闭体称为晶体多面体。

5.自由能最小根据热力学原理，任何物质，包括晶体在内，在平衡条件下，稳定存在的是自由能最小的物相。

对于化学组分相同的物质，在不同的外界热力学条件（温度、压力等）下，可能出现具有不同结构的物相。

然而，其稳定存在的物相都相应于该热力学条件下自由能最小的物相。

编辑推荐

《粉末衍射法测定晶体结构(第2版)(套装上下册)》：现代物理基础丛书。

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>