<<近代X射线多晶体衍射>>

图书基本信息

书名:<<近代X射线多晶体衍射>>

13位ISBN编号: 9787502556044

10位ISBN编号:7502556044

出版时间:2004-10

出版时间:化学工业出版社

作者:马礼

页数:632

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

<<近代X射线多晶体衍射>>

内容概要

本书介绍了X射线多晶体衍射近年的发展,着重在实验技术和数据分析两个方面。

实验技术包括X射线源(常规实验室光源和同步辐射源)、探测器(各种点、线、面探测器)、光学元件(单色、聚焦和准直等)以及计算机的应用(数据处理、数据库和网站)。

还介绍了各种衍射几何,它们的特点及适用范围。

数据分析着重介绍了由Rietveld精修发展来的全谱拟合法,其中除了讲述其基本原理、实验要求、精修 策略等外,还较详细地叙述了在多晶聚集态结构、精修和从头测定晶体结构以及分析晶体内微结构方 面的原理与应用实例。

此外,也介绍了实验数据的校正方法及仪器性能评估的方法。

本书可供从事晶体结构研究、X射线衍射分析工作的研究人员和相关专业学生学习、参考。

<<近代X射线多晶体衍射>>

书籍目录

第一章 绪论--X射线多晶体衍射的发展历程 1一、初期2二、中期8三、近代10参考文献13第二章 X射线 多晶体衍射基本原理16一、晶体结构的基本特点16(一)晶体结构的周期性16(二)晶体结构的对称性27二 倒易点阵50(一)倒易点阵和正点阵互为倒易50(二)倒易点阵参数和正点阵参数之间的关系51(三)正、 倒点阵晶胞对称性的关系55(四)复晶胞的倒易变换56三、X射线衍射基础58(一)原子对X射线的散射59(二)理想小晶体对X射线的衍射65(三)倒易点阵与X射线衍射74四、实际晶体的X射线衍射79(一)实际小 晶体的X射线衍射79(二)多晶体试样的X射线衍射88参考文献90第三章 实验室X射线发生器91一、密封 式X射线管91(一)一般构造91(二)精密陶瓷X射线管92(三)细聚焦X射线管92(四)准单色X射线管96二、旋 转阳极(转靶)X射线管97(一)转靶X射线发生器的一般构造97(二)超高功率转靶X射线发生器99(三)低压 高电流转靶X射线发生器100(四)高能X射线发生器102(五)细聚焦转靶X射线发生器102三、高强度脉冲X 射线源104(一)等离子体X射线源104(二)高能闪光X射线源109(三)激光驱动的X射线源114四、X射线激 光117(一)激光原理117(二)X射线激光120参考文献127第四章 同步X射线源129一、引言129(一)同步辐射 源的特性及与常规X射线源的比较129(二)同步辐射的发展简史132(三)同步辐射装置的现状136二、同步 辐射发生装置140(一)总体介绍140(二)注入器142(三)电子储存环146(四)插入件148(五)光束线151(六)其 他设备154三、同步辐射的性能参数156(一)辐射光谱156(二)辐射的强度161(三)辐射的角分布与发射 度163(四)辐射的时间结构165(五)辐射的偏振性166四、第四代光源与基于加速器的高强脉冲X射线 源168(一)第四代光源168(二)基于加速器的高强脉冲X射线源176参考文献181第五章 探测器184一、探测 器的主要性能指标184(一)量子效率(?QE?)和灵敏度184(二)噪声水平185(三)动力学范围186(四)线性计数 范围与时间分辨率186(五)能量分辨率186二、气体计数管187(一)气体探测器的构造187(二)气体探测器 的计数原理187三、闪烁计数器190(一)闪烁计数器的原理和构造190(二)闪烁晶体与作用190(三)光电倍 增管的放大作用192四、固体探测器192(一)固体探测器的构造和计数原理192(二)固体探测器的性能特 点193(三)正比计数器、闪烁计数器和固体计数器的主要性能参数194五、阵列探测器195(一)一维阵列 式探测器196(二)二维阵列面探测器196六、位敏探测器199(一)一维位敏探测器200(二)二维位敏面探测 器205七、影像板209(一)影像板的计数原理209(二)影像板的特性209八、电荷耦合探测器213(一)CCD的 构造和工作原理213(二)CCD的主要性能指标216(三)X射线CCD探测器217参考文献222第六章 衍射几何 与光路224一、衍射几何的演变225(一)德拜-谢乐(D-B)几何225(二)聚焦几何227(三)布拉格-勃朗泰 诺(B-B)衍射几何236二、光学元件242(一)单晶体元件242(二)毛细管元件247(三)镀膜元件254(四)波带 片265(五)硬X射线折射透镜272三、特定功能的衍射技术275(一)显微衍射275(二)快速衍射277(三)能量 色散多晶体衍射281(四)掠入射技术与表面衍射289(五)原位衍射技术294(六)联合技术305(七)多功能衍 射仪311参考文献314第七章 计算机在多晶体衍射中的应用318一、实验谱的基本处理319(一)数据处理 的目的和步骤319(二)数据的平滑320(三)本底的测定与扣除322(四)K ?2衍射的分离327(五)寻峰335(六) 峰位及峰形参数的测定335(七)数据处理对峰形参数的影响341二、实验数据的分析与应用348(一)几个 软件汇编349(二)计算机自动物相定性分析检索/匹配软件351三、机构、网站、数据库355(一)国际的机 构、网站与数据库355(二)国内的机构、网站与数据库364参考文献368第八章 X射线多晶衍射仪性能的 评估370一、引言370二、衍射数据的校正372(一)衍射线位置(2? ?)的校正372(二)强度(?I、Y?)的校 正377(三)衍射峰形的校正381(四)长时间稳定性的校核386三、仪器性能指标的评估389(一)衍射峰位 置(2? ?值)389(二)衍射峰强度(?I?及?Y?) 392(三)仪器的分辨率394(四)Shewhart控制图395参考文献397第 九章 Rietveld精修与从头晶体结构测定399一、引言399二、Rietveld方法400(一)全谱拟合的原理400(二) 峰形函数?G?k?403(三)峰宽函数?H?k?405(四)本底函数?Y?ib?405(五)择优取向校正407三、Rietveld方法的 实验409(一)Rietveld方法对实验的基本要求409(二)影响多晶体衍射谱准确性和分辨率的一些因素409(三)实验装置416四、Rietveld结构精修与应用419(一)Rietveld结构精修的基本条件419(二)Rietveld精修策 略420(三)精修步骤424(四)Rietveld精修应用举例430五、多晶体衍射从头晶体结构测定436(一)多晶体衍 射从头晶体结构测定的一般步骤438(二)晶胞参数的测定与衍射指数的标定440(三)重叠峰的分解453(四) 解初始结构455(五)结构的扩展与精修461(六)结构参数的计算、结构的描述与表达463(七)多晶体衍射从 头测定晶体结构举例465参考文献472第十章 全谱拟合表征多晶体结构475一、X射线多晶体衍射物相定 性分析475(一)标准数字参比谱全谱匹配顺序检索法476(二)计算谱权重叠加全谱拟合法478二、物相定

<<近代X射线多晶体衍射>>

量分析482(一)原理482(二)应用举例484三、峰形分析研究晶体的微结构487(一)峰形和峰宽的来源488(二)峰形分析的第一步:?g(2 ?)和?f(2 ?)的分离492(三)峰形分析的第二步:从样品峰宽中将尺寸峰宽 与应力峰宽分离498(四)晶粒尺寸分布的求取505(五)全谱拟合测结构参数510参考文献527第十一章 X射 线多晶体衍射的一些应用530一、冶金和机械工业531(一)熔焊中的相转变动力学和相图绘制531(二)机 械合金化钛铜非晶合金的生成机理534(三)加铌对提高发动机材料TiAI合金的高温抗氧化性能机理的研 究536(四)高速钢的耐磨性能与表面喷涂TiN微结构的关系538(五)火箭发动机材料ZrC/W在发动机试车 条件下的热震烧蚀行为研究540二、地球和采矿工业541(一)从X射线衍射研究煤的变形变质来推测造山 中岩类的变形变质541(二)高温高压下橄榄石和尖晶石间的相转变--可能引发深部地震的原因543(三)X 射线衍射分析黏土矿物在石油油气田开发中的应用546(四)铀在侏罗纪鱼粪化石中的富集作用研究548(五)新型矿物的鉴定550三、生物和医药工业550(一)半水合?L?-胱氨酸锌的结构测定550(二)人骨中磷灰 石晶粒尺寸的测定552(三)TiO?2/HA复合生物膜的制备554(四)药物中的多相态现象557四、环保与能 源560(一)染料废水的X射线衍射分析560(二)用粉煤灰固态合成脱硫吸附剂562(三)掺铝氧化锌透明导电 薄膜的结构562(四)Ti?2Cu?0?8Ni?0?2合金的储氢机理563(五)燃料电池中电解质重结晶的结构565五、半 导体和微电子工业567(一)X射线反射率表征薄膜的结构568(二)薄膜材料中应力和弹性常数的测定571(三)金属多层膜巨磁阻和结构的关系574六、石油和化学工业577(一)NiO在分子筛NaY笼中的分散577(二)分子筛中模板分子位置和构象的测定578(三)多孔材料孔内相转变的研究579(四)超细Ni-B非晶催化 剂的热稳定性583(五)高聚物结构及其与性能的关系584七、超导与陶瓷工业587(一)固相反应制 造YBa?2Cu?3O?7的反应历程587(二)不同掺杂元素对La?1?85Sr?0?15CuO?4超导电性的影响589(三)短碳纤 维增轫石英复合材料制备条件的研究590(四)激光熔敷氧化镐热障涂层的微观结构591(五)陶瓷考古593(六)水泥生产的在线监控594参考文献595索引600

<<近代X射线多晶体衍射>>

编辑推荐

本书介绍了X射线多晶体衍射近年的发展,着重在实验技术和数据分析两个方面。

实验技术包括X射线源(常规实验室光源和同步辐射源)、探测器(各种点、线、面探测器)、光学元件(单色、聚焦和准直等)以及计算机的应用(数据处理、数据库和网站)。

还介绍了各种衍射几何,它们的特点及适用范围。

数据分析着重介绍了由Rietveld精修发展来的全谱拟合法,其中除了讲述其基本原理、实验要求、精修 策略等外,还较详细地叙述了在多晶聚集态结构、精修和从头测定晶体结构以及分析晶体内微结构方 面的原理与应用实例。

此外,也介绍了实验数据的校正方法及仪器性能评估的方法。

<<近代X射线多晶体衍射>>

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