

<<高等结构分析>>

图书基本信息

书名：<<高等结构分析>>

13位ISBN编号：9787309032178

10位ISBN编号：7309032179

出版时间：2002-7-1

出版时间：复旦大学出版社

作者：马礼敦

页数：610

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;高等结构分析&gt;&gt;

## 内容概要

第一次印刷两千册在不到一年的时间里即售罄，第二次印刷后也销售迅速，需要再印。

《高等结构分析》出版4年来，评价较好，得过一次二等奖。

承众多读者关爱，除给以赞扬和鼓励外，还提出了一些意见与建议，认为：在内容上缺少了当前结构分析的一个重要方面，即表面结构分析；在显微结构分析方面，只写了电子显微镜，未包括光学显微术、扫描探针显微术等手段；另外，《高等结构分析》的主要内容是各种光谱，从无线电波至X射线的整个电磁波谱都能与物质发生作用，产生各种不同的光谱，用来研究不同层次与方面的物质结构，《高等结构分析》叙述了从核磁共振到X射线光谱和衍射的各种方法，唯独缺少了可见紫外光谱这一研究分子的外层电子结构的重要方法，这些内容均需补充。

为此，决定对《高等结构分析》进行修改补充，出第二版。

本次修改着重在补充前述的3个方面。

由杨新菊撰写了第十二章表面结构分析，王荔、唐浩、马礼敦撰写了第五章可见紫外光谱，李莉扩展了电子显微镜一章，章名也改为显微分析技术，其中扫描探针显微镜部分的撰写还有杨新菊的参与。内容有较大修改补充的还有第一章绪论、第二章核磁共振波谱、第八章X射线吸收精细结构光谱、第十章X射线多晶体衍射等。

其他各章也均有修改和补充。

各位作者当前工作都十分繁忙，但他们放弃了休息，利用节假日、周末完成了《高等结构分析》的撰写和修改。

《高等结构分析》的作者多数在相关领域的服务、教学、科研第一线工作了数十年，累积有丰富的经验，这是《高等结构分析》的基础。

《高等结构分析》还引用了大量的文献、其他作者的工作，正是他们的努力，才发展了方法、扩展了应用。

这些出色的工作使《高等结构分析》的内容更丰富、更充实，必将有助于读者更好地了解和掌握《高等结构分析》的内容。

在此，谨向这众多文献的作者致敬及致谢。

《高等结构分析》的修改和第二版的问世是在复旦大学出版社的支持与鼓励下进行的，还得到了复旦大学研究生院的领导和帮助，特别要提到的是《高等结构分析》有关编辑、校对、排版和出版人员，正是由于他们的督促、他们的认真负责、一丝不苟，才保证《高等结构分析》的出版得以高质量地完成，谨向他们致以由衷的谢意。

今年，是我们的母校——复旦大学的百年诞辰。

我们，复旦大学的学生和校友，已在复旦大学学习工作了数十年，感谢学校、老师对我们的辛勤教育，为我们创造的良好工作环境。

我们努力了，我们还要继续为人民服务。

谨以此书作为我们向学校和老师们的汇报；作为向百年校庆的献礼。

## &lt;&lt;高等结构分析&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 绪论第一节 结构分析的意义第二节 结构分析的内容一、聚集态结构1. 物相结构2. 显微结构3. 空间分布二、分子与晶体结构1. 基团和模块结构2. 分子与晶体结构3. 构型与构象三、电子结构第三节 结构分析的方法一、波与物质的相互作用二、射频波、微波与物质的相互作用三、红外、可见、紫外光与物质的相互作用四、X射线与物质的相互作用1. X射线照射到物质上产生的一些现象2. 现象的解释及可能的应用五、电子与物质的相互作用参考文献第二章 核磁共振波谱第一节 核磁共振中的一些基本知识一、基础知识二、脉冲Fourier变换核磁共振 (PFT NMR) 的基本原理三、磁化强度在磁场里的运动 (章动和旋进) 四、磁化矢量在磁场里的运动方程——Bloch方程五、核磁共振谱仪第二节 简单积算符一、预备知识二、简单积算符第三节 自旋回波第四节  $^1\text{H}$  与  $^{13}\text{C}$  的耦合及极化转移一、 $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  耦合及去耦二、两个重要的极化转移实验: INEPT与DEPT及谱编辑实验1. 基本的INEPT实验2. 重聚 INEPT3. DEPT实验第五节 弛豫一、概论二、两种弛豫三、不同弛豫机制的区别第六节 二维核磁共振一、概述二、常用的同核二维实验 (COSY, DQF-COSY, TOCSY, NOESY, 2D-INADEQUATE) 三、异核二维谱实验 (HETCORR, HMQC, HMBC, HSQC) 第七节 固体核磁共振一、预备知识二、固体宽谱三、固体高分辨NMR四、四极核的固体高分辨NMR第八节 脉冲梯度场一、有关梯度场实验中的一些基本概念二、用梯度场来测定自扩散系数三、梯度场在二维核磁共振实验中的应用第九节 核磁共振新进展一、核磁共振成像——NMR Imaging (MRI) 二、多维 (即三维和四维) 核磁共振技术三、MASJ-HMQC实验四、二维扩散排序谱 (DOSY) 五、最新进展的 TROSY (transverse relaxation optimized spectroscopy) 实验第十节 实验概述实验一 液体高分辨率 $^1\text{H}$  NMR谱实验二 液体高分辨率  $^{13}\text{C}$  NMR谱及去耦实验三 固体高分辨  $^{13}\text{C}$  CP / MAS实验步骤实验四 弛豫时间  $T_1$  的测定参考文献第三章 电子顺磁共振波谱法第一节 引言一、EPR的发展二、EPR的研究对象第二节 基本原理一、物质的磁性二、磁场和磁矩三、电子自旋磁矩四、共振条件五、线宽、线型和弛豫1. 线宽2. 自旋弛豫3. 线型六、g因子1. g因子概念2. g因子的测定七、超精细结构1. 超精细相互作用2. 超精细谱线八、自旋浓度第三节 仪器和方法一、微波系统1. 微波及其特点2. 微波器件二、磁铁系统1. 电磁铁2. 磁场的选择3. 磁场的技术要求4. 磁铁电源5. 磁场测量三、谐振腔四、场调制和信号检测系统五、波谱仪的主要技术指标1. 灵敏度2. 分辨率3. 稳定性六、实验技术1. 样品制备2. 仪器J作参数的选择第四节 应用一、稳定性顺磁物质的直接检测1. 有机自由基的研究2. 催化剂的研究二、自旋捕获法——高活性自由基的检测1. 原理和方法2. 自旋捕获技术的应用3. 其他方法三、自旋标记法和自旋探针法——逆磁性物质的 EPR研究1. 自旋标记法2. 自旋探针法第五节 EPR进展一、电子-核双共振二、电子-电子双共振三、电子-核-核三共振四、时间域电子顺磁共振第六节 实验实验一 EPR波谱仪的工作参数选择及其性能检测实验二 EPR波谱参数的测量实验三 Fremy盐EPR谱的检测及理论模拟参考文献第四章 红外吸收光谱第一节 红外吸收光谱的发展第二节 红外吸收光谱的基本原理一、红外吸收光谱的形成及红外区的分类二、双原子分子的转动光谱 (AB型) 三、双原子分子的振动光谱四、多原子分子的振动-转动光谱1. 简正振动的数目2. 多原子分子的振动-转动光谱五、红外吸收光谱获得的条件. 第三节 红外光谱仪器一、双光束红外分光光度计 (色散型) 二、Fourier变换红外光谱仪1. Fourier变换红外光谱仪的构成2. 工作原理3. Fourier变换红外光谱的数学表达式. 4. Fourier变换红外光谱仪的主要优缺点第四节 红外吸收光谱的应用一、红外吸收光谱与分子结构的关系1. 分子振动的分类2. 各官能团的吸收频率3. 影响基团频率变动的几个因素二、红外光谱的定性分析1. 红外定性分析的优点2. 谱图的测绘3. 谱图解析三、红外光谱的特殊附件及应用1. 反射技术及应用2. 光声光谱 PAS及应用3. 催化剂吸附态的原位红外光谱测绘技术及应用四、红外光谱的定量分析1. 定量分析原理2. 定量分析方法的介绍第五节 Fourier变换红外光谱新技术与新发展一、Fourier变换红外光谱联用技术1. 气相色谱与红外光谱联用 (GC / IR) 2. 超临界流体色谱与红外光谱联用 (SFC / IR) 3. 高效液相色谱与红外光谱联用 (LC / IR) 二、显微红外光谱法1. 红外显微镜原理和仪器结构2. 显微红外的应用举例三、Fourier变换红外光谱的光纤技术1. 光纤与FTIR光谱联用的优点2. 红外光导纤维举例四、同步辐射红外光源的应用第六节 实验实验一 FTIR光谱仪的性能检验及红外光谱的常规测试实验二 用红外光谱的特殊附件测定样品实验三 红外光谱分析未知样品参考文献第五章 拉曼光谱第一节 引言第二节 拉曼光谱原理一、光散射二、拉曼光谱的经典解释三、拉曼散射的选择定则1.

## &lt;&lt;高等结构分析&gt;&gt;

经典解释2. 量子解释四、拉曼散射的偏振特性五、分子振动的基本理论1. 简正振动2. 对称性的考虑  
第三节 实验仪器一、仪器组成一、激光器三、样品装置四、单色器五、检测和记录系统六、控制及数据处理系统七、拉曼位移的单位八、拉曼光谱的测量要求九、仪器性能第四节 应用示例一、在有机化学中的应用二、在无机化学中的应用三、在分析化学中的应用四、表面增强拉曼光谱五、拉曼光谱在  
高分子材料中的应用六、拉曼光谱在生物学中的应用七、拉曼光谱在物理学中的应用和研究1. 半导体2. 超晶格与薄膜类材料第五节 拉曼光谱的技术进展第六节 实验实验一 斯托克斯和反斯托克斯拉曼  
光谱测量实验二 CCl<sub>4</sub>拉曼散射的偏振特性测量实验三 拉曼光谱测定同位素参考文献第六章 有机质谱  
第一节 方法原理第二节 实验仪器一、离子源二、质量分析器三、检测器四、真空系统五、计算机控制  
和数据处理系统六、主要技术指标七、联用技术第三节 谱图解析一、用质谱数据导出化合物的分子  
式二、有机质谱的碎裂机制三、影响质谱碎裂反应的因素四、常见各类有机化合物的质谱规律1. 碳  
氢化合物2. 醇类3. 醚4. 醛和酮5. 羧酸和酯6. 胺类化合物7. 酰胺8. 腈类9. 硝基化合物10. 硫化  
物(硫醇和硫醚)11. 卤代物第四节 应用举例第五节 有机质谱新进展第六节 实验实验一 质谱仪器的  
检定实验二 芳香胺的芳香醛衍生物的化学电离质谱(CI)测定实验三 废水中半挥发性有机污染物的  
气相色谱-质谱分析(GC/MS定性定量分析技术)参考文献第七章 X射线吸收精细结构光谱第一节  
前言一、X射线的发现与其重要作用二、X射线吸收精细结构的特点第二节 X射线吸收光谱一、X射线  
吸收光谱与精细结构二、产生XAFS的物理机制1. 低能XANES2. EXAFS3. XANES第三节 实验方法一  
、同步辐射XAFS装置二、实验室XAFS装置三、各种XAFS实验技术1. 荧光法XAFS技术2. 表面 XAFS  
技术3. 时间关联XAFS技术4. 自旋分辨XAFS技术5. 能量色散EXAFS技术6. 软X射线XAFS技术第四节  
EXAFS的表达式及数据处理一、EXAFS的表达式二、EXAFS的数据分析1. X(k)的获得2. 结构数据  
的获得第五节 XAFS的应用一、XAFS技术在催化剂结构研究中的应用二、XAFS在表面科学中的应用三  
、XAFS技术在生命科学中的应用四、XAFS技术在材料科学中的应用第六节 XAFS的发展一、XAFS研  
究领域的扩大二、XAFS实验技术的发展1. 与其他技术的结合2. 显微XAFS3. 在极端条件下的 XAFS4  
. 快速XAFS三、一些新的XAFS应用领域1. 磁性材料的研究2. 在环境科学中的应用3. 在电化学中的  
应用第七节 实验实验一 EXAFS测定局域结构第八节 附录一、同步辐射的发生与特性1. 同步辐射的  
发现与发展2. 同步辐射装置3. 同步辐射的特性二、常用各单色器晶面间距三、各元素的K边及L边吸收  
限波长参考文献第八章 X射线单晶衍射结构分析第一节 X射线单晶衍射结构分析的原理一、单晶结构  
的特点二、单晶X射线衍射的方向三、单晶X射线衍射线的强度四、如何由X射线衍射的方向和强度抽  
象出结构信息第二节 X射线单晶衍射结构分析的实验方法一、倒易点阵二、倒易点阵与反射球三、衍  
射数据收集方法1. Laue法2. 回摆法3. Weissenberg照相法4. 旋进照相法四、计算机自动控制的四圆  
单晶衍射仪的原理和结构第三节 利用四圆衍射仪进行单晶结构分析的一般过程一、单晶的挑选和安装  
二、晶胞参数和方位矩阵的测定三、晶系和Laue对称性的确定四、衍射数据的收集五、系统消光规律  
和空间群的测定六、强度数据的还原和校正七、晶体结构的解释1. Patterson法2. 直接法八、结构的  
修正和发展九、结构的表达和计算第四节 单晶结构分析的测定实例一、以Patterson函数解晶体结构的  
实例二、直接法解结构的实例三、绝对构型的测定第五节 单晶结构分析技术的发展一、同步辐射X射  
线单晶衍射技术二、影像板及面探测器三、结构生物学的发展四、蛋白质晶体结构的解析第六节 实验  
实验一 晶胞参数的测定和衍射数据的收集实验二 衍射数据的校正还原和结构的解析实验三 晶体结构  
的精修、发展和表达第七节 附录一、系统消光规律二、结晶学数据库参考文献第九章 X射线多晶体衍  
射第一节 X射线多晶体衍射的基本原理一、晶体结构周期性的面间距表示法二、多晶体衍射的倒易点  
阵解释三、X射线多晶体衍射的基本公式1. 多晶体衍射方向的公式2. 多晶体衍射强度的公式第二节  
X射线多晶体衍射的实验方法与衍射谱一、实验方法1. 实验装置的基本构造2. X射线发生器3. 测角  
器4. 探测和记录系统5. 控制和数据处理系统二、多晶体衍射谱及可提供的信息第三节 衍射峰位置的  
测量与应用一、衍射峰位置的测量1. 峰顶法2. 中点法3. 质心法二、点阵常数的测定和应用1. 点阵  
常数的测定2. 点阵常数的精确测定3. 点阵常数测定的一些应用三、X射线物相定性分析及其应用1  
. X射线物相定性分析原理与方法2. X射线粉末衍射参比谱3. 定性相分析应用举例第四节 衍射线强度  
的测量和应用一、衍射峰强度和测量二、X射线物相定量分析与应用1. 衍射线的积分强度2. 物相定  
量分析方法3. 定量相分析法应用举例三、择优取向的研究与应用1. 择优取向现象2. 择优取向材料的  
衍射特点3. 织构的反极图表示法4. 测定织构的用处第五节 衍射峰形的分析与应用一、影响衍射峰形

<<高等结构分析>>

的各种因素1. 仪器因素2. 样品结构因素二、晶粒大小与残余应变的测定1. 晶粒大小及残余应变与衍射峰宽的关系2. 衍射峰形的分离3. 测量晶粒大小与残余应变的应用第六节 粉末衍射的一些发展一、多晶体衍射全谱峰形拟合1. Rietveld全谱峰形拟合法2. Rietveld全谱峰形拟合精修结构应用举例3. 粉末衍射从头晶体结构测定4. 全谱峰形拟合法在粉末衍射传统领域中的应用二、同步辐射多晶体衍射1. 高分辨粉末衍射2. 时间分辨与原位研究3. 显微衍射4. 在极端条件下的粉末衍射与能量色散粉末衍射5. 表面和薄膜衍射第七节 实验实验一 物相定性分析实验二 参考强度比法物相定量分析实验三 全谱拟合法测定晶粒大小与残余应力实验四 粉末衍射谱的指标化参考文献第十章 有机质谱第十一章 显微分析技术

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>