

课程名称：X-射线晶体学

一、课程编码：1900006

课内学时：48 学分：3

二、适用学科专业：化学、化工、物理、材料。

三、先修课程：微积分，线性代数，概率统计，大学物理和大学化学

四、教学目标

通过本课程的学习，使相关专业的学生掌握一些重要的晶体学原理和概念，能独立进行衍射实验和后续的数据分析，并能够分析晶体学结果，评估其意义。提升学生应用晶体学知识解决实际问题的能力。

五、教学方式

课堂教学和讨论，实验和数据分析实习相结合。

六、主要内容及学时分配

- | | |
|----------------------|-------|
| 1. 晶体学基础 | 9 学时 |
| 1.1 结晶态 | |
| 1.2 晶体对称 | |
| 1.3 晶体点阵 | |
| 1.4 倒易点阵 | |
| 1.5 空间群 | |
| 1.6 最紧密堆积 | |
| 2. 晶体对 X-射线的衍射 | 9 学时 |
| 2.1 X-射线物理学 | |
| 2.2 X-射线散射的一般过程 | |
| 2.3 Laue 方程和Bragg 方程 | |
| 2.4 衍射强度 | |
| 2.5 空间群确定 | |
| 3. 单晶结构分析 | 15 学时 |
| 3.1 数据收集和还原 | |
| 3.2 相位问题 | |
| 3.3 Patterson 函数 | |
| 3.4 直接法 | |
| 3.5 Fourier 合成 | |
| 3.6 结构修正 | |
| 3.7 结构表达 | |
| 4. 粉末衍射 | 15 学时 |
| 4.1 粉末衍射图 | |
| 4.2 粉末衍射实验 | |
| 4.3 基本数据处理 | |
| 4.4 晶粒大小 | |
| 4.5 相分析 | |

4.6 点阵常数的确定和修正

4.7 粉末衍射结构分析

七、考核与成绩评定

课堂成绩20%，作业20%，期末考试60%

八、参考书及学生必读参考资料

本课程无唯一指定教材，以下书目可供参。

1. Carmelo Giacovazzo et al. Fundamentals of Crystallography [M]. Oxford: Oxford University Press, 1992.
2. Alexander J Blake et al. Crystal Structure Analysis: Principles and Practice (2nd Ed.)[M], Oxford: Oxford University Press, 2009.
3. Vitalij Pecharsky et al. Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials (2nd Ed.)[M], USA: Springer, 2009.

九、大纲撰写人：马宏伟