

测定晶体结构的系统试差法

侯永庚; 陈稚芳; 傅亨

中国科学院化学研究所

摘要:

本文提出了一种测定晶体结构位相的系统试差法。它是根据未知反射和已知反射间的相互关系, 按照概率上可测的条件, 把它们划分为可测系统, 并在Sayre公式的基础上建立可测系统的位相超解方程, 再以试差法求解, 从整体上求得未知反射的位相。该方法的特点是可以控制误差和单解。它不仅适用于一般中小分子结构的测定, 也可能为难解结构和大分子结构测定开辟一条新的途径。

关键词:

收稿日期 1987-05-11 修回日期 1988-04-16 网络版发布日期 1989-02-15

通讯作者: 侯永庚 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(4232KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

[本文关键词相关文章](#)

[本文作者相关文章](#)

▶ [侯永庚](#)

▶ [陈稚芳](#)

▶ [傅亨](#)