

秦善,王海青. 粉晶X射线衍射理论计算和CIF数据转换软件—XRAY[J]. 地质论评, 2003, 49(1): 81-84

粉晶X射线衍射理论计算和CIF数据转换软件—XRAY [点此下载全文](#)

[秦善](#) [王海青](#)

北京大学地质学系 100871 (秦善)  
，北京大学地质学系 100871(王海青)

基金项目：教育部留学人员回国科研启动基金

DOI:

摘要:

本文简要介绍一个进行粉晶X射线理论计算和CIF文件转换的计算机软件-XRAY，其输入内容仅要求X射线波长等，输出内容包括衍射图谱的图形方式和一个包含 $2\theta$ 、 $d$ 值、相对强度和指标化的列表，并可进行CIF文件的输入输出工具以及用于X射线结晶学的数学演示。

关键词：[X射线衍射](#) [CIF文件](#) [计算机程序](#) [矿物](#) [粉晶](#) [空间群](#) [晶胞参数](#)

XRAY: A Computer Program for Calculating X-ray Powder Diffraction Patterns and Converting CIF File [Download Fulltext](#)

QIN Shan, WANG Haiqing Department of Geology, Peking University, Beijing, 100871

Fund Project:

Abstract:

Keywords: [X-ray diffraction](#) [CIF file](#) [computer program](#) [mineral](#)

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)