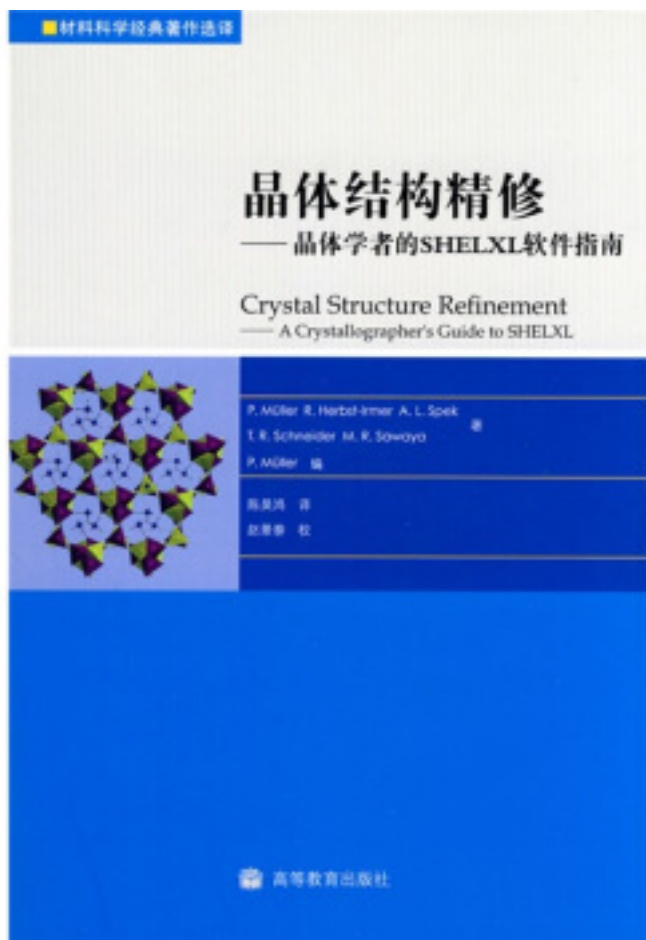


晶体结构精修：晶体学者的SHELXL软件指南（附光盘1张） [Crystal Structure Refinement:A Crystallographers Guide to SHELXL]



[晶体结构精修：晶体学者的SHELXL软件指南（附光盘1张） \[Crystal Structure Refinement:A Crystallographers Guide to SHELXL\] 下载链接1](#)

著者:[美] 马勒 等 著，陈昊鸿 译

[晶体结构精修：晶体学者的SHELXL软件指南（附光盘1张） \[Crystal Structure Refinement:A Crystallographers Guide to SHELXL\] 下载链接1](#)

标签

评论

书不错。。。。。。

好书，真的值得的购买。

速度快，书也不错，值得买

正版图书，纸质印刷看起来都很棒，老公说是学晶体必备的一本秘籍！

还不错，这是感觉市面上也找不到比这个更好的关于晶体结构精修的书了。

是自学晶体解析用，书挺好的，适合学习晶体解析真的，还有光盘例子，配送也及时。

常年以来都是圣经级宝典，拥有一本没问题！

不错的专业书，我受益匪浅

很好的参考书，非常满意，物流很给力

给同学买的，感觉还不错。

京东活动买的，一直信赖京东，先囤起来

大概看了看，书不错，开卷有益，好好学习天天向上！

很好的书希望会学会

很好很好，正版，字体清晰。

会哈会哈更会哈更会哈更

京东多快好省，现在基本都在京东买了

很不错，适用于做晶体结构分析

不错的专业书，值得一看哈！

质量超好，物流快速，还会下次光顾。

不错不错不错不错不错不错不错不错不错不错不错不错不错不错不错

以前没有接触过，经过半年的努力，也算可以解出基本结构，因而再买本书充实下，希望对单晶解析方面有更大的提升

人也在不断的学习，书也是要常看的。

京东送货快 价格也合适

质量还可以。收货晚了。懒得退换了

挺好的，有光盘，慢慢学习！

一直想买，终于买到

书很好，是正品，晶体初学者必备。

还好。。。。。。正看呢。。。。

东西收到了，很不错

不知道好学不？慢慢提上日程！

正版低价，值得购买！！！！！！

晶体结构精修：晶体学者的SHELXL软件指南（附光盘1张）

这本书是对于SHELXTL软件进行小分子精修的最理想的教材，值得每一个做晶体相关工作的化学工作者反复学习和实践。

好书值得分享

质量很好！内容也不错，值得仔细研读练习。

送货很快，书也很好

虽然不能直接用上，有教材总比没有好

这本书还不错，就是快递太慢了

正品行货，值得买，下次还会购买

结构精修宝典，好好学习学习

晶体结构精修：晶体学者的SHELXL软件指南

挺好，内容挺详细的！

书很好~光盘里的例子不错

实用的工具书，查询方便

好书，单晶必备啊。哈哈

听说晶体精修很难？所以提前买了本这个

自己之前已经买了本，实验室也有好多人买。然后新生有要我帮着买了两本。
内容很好。看着也比较容易。比那些英文的资料好事好很多了。

还没来得及细看，感觉还不错

其实已经复印过英文版了，不过看到中文版还是决定买一本
解决无序一类的精修问题时候仔细阅读过相关内容 这种书都是要结合实际来应用的

到货很快，书也很好，一次不错的购物体验

书很好，好好学习，对自己的学习很有帮助

一本很好的辅导用书，进阶必备

正版书 比新华书店给力

作者对晶体结构解析有丰富的实践经验，这是中国教科书写手们往往不具备的。
抢了推荐好书。

?买了四本了

客服态度相当的好，打了六个电话发了三次短信，我才看到。实在感觉自己有些不好意思了。

盼望已久的书，收到就马上开始研究，收获颇丰！

帮同事买的，送货超快的，同事说服务很好！！

书不错，正版，值得信赖！

专业书籍，参考使用，还比较好

用得着的人都懂的，必修！

不错，很好的一本工具书

本来有英文版的，很好，而且对我自己所学的专业非常有用，所以这个翻译版的是必须买的。

首先书的质量还是不错的。这是学习晶体解析必备的一本经典的参考书。

作者是SHELXTL软件的编者之一，当时他是Sheldrick教授的博士。

专业详细的晶体结构书籍，很不错

是正版的书啊，还没看呢

书籍的纸质很好，印刷清晰，内容很好，我很喜欢！

内容丰富写的很好，很适合大学生或晶体学者研读。

搞配位化学的必买啊搞配位化学的必买啊

昨天拿到这本书，我从晚上十二点关电脑之后开始看，看到三点钟，基本看完了。之前看过英文版的pdf，非常专业，让我补充了很多基础知识，里面对晶体结构解析提供了不少解决的途径，我虽然也得到了这本书的pdf，不过我觉得还是值得一买，仔细研读和练习，这对于一些要从事晶体结构精修会有很大帮助。我暂时还只是通读了一下，有时间的话要好好看一些，里面的精修方法还要在实际的结构解析过程中慢慢揣摩和应用！

喜欢这本书，牛人推荐的书，理论上应该很不错

晶体学必备，解晶体用，有很多实例，推荐之

这书写的太晦涩，不适合初学者，既然是指导晶体解析，就应该是个详细步骤，看了这书还是不会解

单晶结构解析的高级书籍，但是有些地方看不懂，配套例子很丰富

感觉比陈小明那本书讲的详细和实用多了，如果是想学习解晶体的话严重推荐~~

很好，物流很快，比较满意。

内容不错，工作上要用到的。

正版全新的 图书质量很好

不错的书，非常好。不错的书，非常好。

不错哦，没有推荐错！

正品，不错的一次购物

看起来是正版，挺好的

有很多实例, 但精通需要多练. 适合研究生和研究人员

很好的专业书，很多地方买不到，很好，这样的服务希望京东越做越好

如题，想学好晶体结构精修的人都应该看看这本书。

附赠光盘资料，慢慢学习。。。

软甲指南，没什么好说的。 翻译不错。

值得推荐，学习中....

还不错，挺好的还不错，挺好的

书的印刷还可以，值得购买

还不错啦，专业需要的书籍，买来学习一下

好用的东西，很不错。

陈小明的书，早就想买了

晶体结构精修的，买来自己看，很好的书

专业课本，讲的比较简单，适用于入门的同学

通向解析单晶更高层次的必备良书

适合做生物类的人用，大分子之类的例子比较多

是有关方面的一本好书

讲的容易理解，覆盖了较多难题

非常之好非常之好非常之好

半价帮同学买的，值！

没啥新的，也就那样的说

SHELXL是目前国际上使用最广泛的结构精修程序，不仅功能比较强大，

初学者很好用的一本书，就是光盘差点，都是一些运算结果，网页程序帮助文件。

专业书籍 帮买的哈 我觉得没用

很经典的一本书，作者是一群大牛，翻译的还可以

还不错 很专业的书 但是比较适合做大分子体系的

还可以吧 不错

不错不错？

又买一本

好好好

挺好的

还没有看，感觉光盘就是软件内的帮助文件

[美]马勒，等写的的书都写得很好，还是朋友推荐我看的，后来就非非常喜欢，他的书了。除了他的书，我和我家小孩还喜欢看郑渊洁、杨红樱、黄晓阳、小桥老树、王永杰、杨其铎、晓玲叮当、方洲，他们的书我觉得都写得很好。晶体结构精修晶体学者的软件指南（附光盘1张），很值得看，价格也非常便宜，比实体店买便宜好多还省车费。书的内容直得一读是目前国际上使用最广泛的结构精修程序，不仅功能比较强大，而且使用比较方便。晶体结构精修晶体学者的软件指南)既是一本面向晶体学者的软件指南，也是一本教科书。它涵盖了大量晶体结构精修中可能遇到的难题，一步一步展示晶体结构精修的方方面面，并通过示例文件和详细讲解说明问题、阐述机理。随书光盘提供了重现这些精修过程需要的所有文件，方便读者自行练习和对照。对于具有初步X射线

晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者，晶体结构精修晶体学者的软件指南是一本非常优秀的教材即使对于多年从事晶体结构解析的专家，晶体结构精修晶体学者的软件指南也有很好的参考价值。，阅读了一下，写得很好，晶体结构精修晶体学者的软件指南详细介绍了晶体结构精修中的常见问题及其处理技巧，采用具体示例的方式加以说明。晶体结构精修晶体学者的软件指南使用晶体学领域内享有盛誉并广泛使用的精修软件——。对小分子晶体结构精修中的加氢、原子类型指定、无序、赝对称、孪晶、赝像等方面进行了阐述，讨论了小分子晶体结构验证的必要性和手段，同时对蛋白质等生物大分子的精修和结构验证也进行了概述。书中每个示例的原始数据和各步精修操作的结果文件均附于随书光盘，方便读者自行练习使用。晶体结构精修晶体学者的软件指南有助于促进对晶体结构精修知识的理解和运用，掌握先进的结构解析工具，提高晶体结构测定的技术水平。晶体结构精修晶体学者的软件指南可以作为具有初步射线晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者的进修教材，也可以作为相关研究人员的参考书。，内容也很丰富。，一本书多读几次，3.3在中定位氢原子实际精修中-键长和--键角一般通过约束条件指定。简化了氢原子位置的确定除了可以生成正确的氢原子位置外，指令还能对任何指定的-以及其他大多数的-产生各种必要的约束条件。指令的一般语法如下表示几何位置，确定了所要生成的氢原子数目。则指明程序如何处理氢原子或者原子，后者由原子名称（）指定。可以计算合适的氢原子位置，生成这些氢原子并且正确地加入结合这些待定氢原子一起进行的精修所必需的约束（关于指令的全面介绍参见第二章）。在文件中，新加入的氢原子位于行之后，并且其后紧跟着0行代表这个氢原子区段的结束。新加入的氢原子的各向同性值由程序自动设为1.2（对甲

读了这本书之后，晶体结构精修晶体学者的软件指南（附光盘1张），超值。买书就来京东商城。价格还比别家便宜，还免邮费不错，速度还真是快而且都是正版书。是目前国际上使用最广泛的结构精修程序，不仅功能比较强大，而且使用比较方便。晶体结构精修晶体学者的软件指南)既是一本面向晶体学者的软件指南，也是一本教科书。它涵盖了大量晶体结构精修中可能遇到的难题，一步一步展示晶体结构精修的方方面面，并通过示例文件和详细讲解说明问题、阐述机理。随书光盘提供了重现这些精修过程需要的所有文件，方便读者自行练习和对照。对于具有初步X射线晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者，晶体结构精修晶体学者的软件指南是一本非常优秀的教材即使对于多年从事晶体结构解析的专家，晶体结构精修晶体学者的软件指南也有很好的参考价值。，买回来觉得还是非常值的。我喜欢看书，喜欢看各种各样的书，看的很杂，文学名著，流行小说都看，只要作者的文笔不是太差，总能让我从头到脚看完整本书。只不过很多时候是当成故事来看，看完了感叹一番也就丢下了。所在来这里买书是非常明智的。然而，目前社会上还有许多人被一些价值不大的东西所束缚，却自得其乐，还觉得很满足。经过几百年的探索和发展，人们对物质需求已不再迫切，但对于精神自由的需求却无端被抹杀了。总之，我认为现代人最缺乏的就是一种开阔进取，寻找最大自由的精神。中国人讲虚实相生，天人合一的思想，于空寂处见流行，于流行处见空寂，从而获得对于道的体悟，唯道集虚。这在传统的艺术中得到了充分的体现，因此中国古代的绘画，提倡留白、布白，用空白来表现丰富多彩的想象空间和广博深广的人生意味，体现了包纳万物、吞吐一切的胸襟和情怀。让我得到了一种生活情趣和审美方式，伴着笔墨的清香，细细体味，那自由孤寂的灵魂，高尚清真的人格魅力，在寻求美的道路上指引着我，让我抛弃浮躁的世俗，向美学丛林的深处迈进。合上书，闭上眼，书的余香犹存，而我脑海里浮现的，是一个皎皎明月，仙仙白云，鸿雁高翔，缀叶如雨的冲淡清幽境界。愿我们身边多一些主教般光明的使者，有更多人能加入到助人为乐、见义勇为的队伍中来。社会需要这样的人，世界需要这样的人，只有这样我们才能创造我们的生活，晶体结构精修晶体学者的软件指南详细介绍了晶体结构精修中的常见问题及其处理技巧，采用具体示例的方式加以说明。晶体结构精修晶体学者的软件指南使用晶体学领域内享有盛誉并广泛使用的精修软件——。对小分子晶体结构精修中的加氢、原子类型指定、无序、赝对称、孪晶、赝像等方面进行了阐述，讨论了小分子晶体结构验证的必要性和手段，同时对蛋白质等生物大分子的精修和结构验证也进行了概述。书中每

这本书有一定参考价值。SHELXL是目前国际上使用最广泛的结构精修程序，不仅功能比较强大，而且使用比较方便。《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》既是一本面向晶体学家的SHELXL软件指南，也是一本教科书。它涵盖了大量晶体结构精修中可能遇到的难题，一步一步展示晶体结构精修的方方面面，并通过示例文件和详细讲解说明问题、阐述机理。随书光盘提供了重现这些精修过程需要的所有文件，方便读者自行练习和对照。

对于具有初步X射线晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者，《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》是一本非常优秀的教材；即使对于多年从事晶体结构解析的专家，《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》也有很好的参考价值。

《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》详细介绍了晶体结构精修中的常见问题及其处理技巧，采用具体示例的方式加以说明。《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》使用晶体学领域内享有盛誉并广泛使用的精修软件——SHELXL。对小分子晶体结构精修中的加氢、原子类型指定、无序、赝对称、孪晶、赝像等方面进行了阐述，讨论了小分子晶体结构验证的必要性和手段，同时对蛋白质等生物大分子的精修和结构验证也进行了概述。书中每个示例的原始数据和各步精修操作的结果文件均附于随书光盘，方便读者自行练习使用。《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》有助于促进对晶体结构精修知识的理解和运用，掌握先进的结构解析工具，提高晶体结构测定的技术水平。《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》可以作为具有初步X射线晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者的进修教材，也可以作为相关研究人员的参考书。

SHELXL是目前国际上使用最广泛的结构精修程序，不仅功能比较强大，而且使用比较方便。《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》既是一本面向晶体学家的SHELXL软件指南，也是一本教科书。它涵盖了大量晶体结构精修中可能遇到的难题，一步一步展示晶体结构精修的方方面面，并通过示例文件和详细讲解说明问题、阐述机理。随书光盘提供了重现这些精修过程需要的所有文件，方便读者自行练习和对照。

对于具有初步X射线晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者，《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》是一本非常优秀的教材；即使对于多年从事晶体结构解析的专家，《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》也有很好的参考价值。

SHELXL是目前国际上使用最广泛的结构精修程序，不仅功能比较强大，而且使用比较方便。《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》既是一本面向晶体学家的SHELXL软件指南，也是一本教科书。它涵盖了大量晶体结构精修中可能遇到的难题，一步一步展示晶体结构精修的方方面面，并通过示例文件和详细讲解说明问题、阐述机理。随书光盘提供了重现这些精修过程需要的所有文件，方便读者自行练习和对照。

对于具有初步X射线晶体结构测定基础、能运行相关软件的入门者，《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》是一本非常优秀的教材；即使对于多年从事晶体结构解析的专家，《晶体结构精修：晶体学家的SHELXL软件指南》也有很好的参考价值。

金牌销售特训营金牌销售员的习惯和描述的一样，好评！上周周六，闲来无事，上午上了一个上午网，想起好久没买书了，似乎我买书有点上瘾，一段时间不逛书店就周身不爽，难道男人逛书店就象女人逛商场似的上瘾于是下楼吃了碗面，这段时间非常冷，还下这雨，到书店主要目的是买一大堆书，上次专程去买却被告知缺货，这次应该可以买到了吧。可是到一楼的查询处问，小姐却说昨天刚到的一批又卖完了！晕！为什么不多进点货，于是上京东挑选书。好了，废话不说。好了，我现在来说说这本书的观感吧，一个人重要的是找到自己的腔调，不论说话还是写字。腔调一旦确立，就好比打架有了块趁手的板砖，怎么使怎么顺手，怎么拍怎么有劲，顺带着身体姿态也挥洒自如，打架简直成了舞蹈，兼有了美感和韵味。要论到写字，腔调甚至先于主题，它是一个人特有的形式，或者工具不这么说，不这么写，就会别扭工欲善其事，必先利其器，腔调有时候就是器，有时候又是事，对一篇文章或者一本书来说，器就是事，事就是器。这本书

，的确是用他特有的腔调表达了对腔调本身的赞美。|发货真是出乎意料的快，昨天下午订的货，第二天一早就收到了，赞一个，书质量很好，正版。独立包装，每一本有购物清单，让人放心。帮人家买的书，周五买的书，周天就收到了，快递很好也很快，包装很完整，跟同学一起买的两本，我们都很喜欢，谢谢！了解京东2013年3月30日晚间，京东商城正式将原域名360更换为，并同步推出名为的吉祥物形象，其首页也进行了一定程度改版。此外，用户在输入域名后，网页也自动跳转至。对于更换域名，京东方面表示，相对于原域名360，新切换的域名更符合中国用户语言习惯，简洁明了，使全球消费者都可以方便快捷地访问京东。同时，作为京东二字的拼音首字母拼写，也更易于和京东品牌产生联想，有利于京东品牌形象的传播和提升。京东在进步，京东越做越大。|||好了，现在给大家介绍两本本好书谢谢你离开我是张小娴在想念后时隔两年推出的新散文集。从拿到文稿到把它送到读者面前，几个月的时间，欣喜与不舍交杂。这是张小娴最美的散文。美在每个充满灵性的文字，美在细细道来的倾诉话语。美在作者书写时真实饱满的情绪，更美在打动人心的厚重情感。从装帧到设计前所未有的突破，每个精致跳动的文字，不再只是黑白配，而是有了鲜艳的色彩，首次全彩印刷，法国著名唯美派插画大师，亲绘插图。|两年的等待加最美的文字，就是你面前这本最值得期待的新作。洗脑术怎样有逻辑地说服他人全球最高端隐秘的心理学课程，彻底改变你思维逻辑的头脑风暴。白宫智囊团、美国、全球十大上市公司总裁都在秘密学习！当今世界最高明的思想控制与精神绑架，政治、宗教、信仰给

再便宜点就好了

发货真是出乎意料的快，昨天下午订的货，第二天一早就收到了，赞一个，书质量很好，正版。独立包装，每一本有购物清单，让人放心。帮人家买的书，周五买的书，周天就收到了，快递很好也很快，包装很完整，跟同学一起买的两本，我们都很喜欢，谢谢！我在网上买的几本书送到了。取书的时候，忽然想起一家小书店，就在我们大院对面的街上，以前我常去，书店的名字毫无记忆，但店里的女老板我很熟，每次需要什么书都先给她打电话说好，晚上散步再去取。我们像朋友一样聊天，她还时常替读者找我签名。可是，自从学会从网上购书后，我再也没去过她那里了，今天忽然想起她，晚上散步到她那里，她要我教她在网上买书，这就是帮她在京东上买了这本书。好了，废话不说。通读这本书，是需要细火慢烤地慢慢品味和幽寂沉思的。亲切、随意、简略，给人洁净而又深沉的感触，这样的书我久矣读不到了，今天读来实在是一件叫人高兴之事。作者审视历史，拷问灵魂，洋溢着哲思的火花。人生是一段段的旅程，也是需要承载物的。因为火车，发生过多少相聚和分离。当一声低鸣响起，多少记忆将载入历史的尘梦中啊。其实这本书一开始我也没看上，是朋友极力推荐加上书封那个有点像史努比的小人无辜又无奈的小眼神吸引了我，决定只是翻一下就好，不过那开篇的序言之幽默一下子便抓住了我的眼睛，一个词来形容——“太逗了”。|据说，2011年8月24日，京东与支付宝合作到期。官方公告显示，京东商城已经全面停用支付宝，除了无法使用支付服务外，使用支付宝账号登录的功能也一并被停用。京东商城创始人刘先生5月份曾表示京东弃用支付宝原因是支付宝的费率太贵，为快钱等公司的4倍。在弃支付宝而去之后，京东商城转投银联怀抱。这点我很喜欢，因为支付宝我从来就不用，用起来也很麻烦的。好了，现在给大家介绍三本好书：《古拉格：一部历史》在这部受到普遍称赞的权威性著作中，安妮·阿普尔鲍姆第一次对古拉格——一个大批关押了成百上千万政治犯和刑事犯的集中营——进行了完全纪实性的描述，从它在俄国革命中的起源，到斯大林治下的扩张，再到公开性时代的瓦解。阿普尔鲍姆深刻地再现了劳改营生活的本质并且将其与苏联的宏观历史联系起来。《古拉格：一部历史》出版之后立即被认为是一部人们期待已久的里程碑式的学术著作，对于任何一个希望了解二十世纪历史的人来说，它都是一本必读书。厌倦了工作中的枯燥忙碌？吃腻了生活中的寻常美味？那就亲手来做一款面包尝尝吧！面包不仅是物质生活的代名词，还是温暖和力量的化身。作者和你一样，是一个忙碌的上班族，但她却用六年的烘焙经验告诉你：只要有一颗热爱生活的心，一双勤快灵活的手，美味的面包和美好的生活，统统都属于你！<停在新西兰刚刚好>100%新西兰=1%旅行 1%打工 98%成长全世界年轻人都在打工度假！错过30岁就等下辈子！她叫巴道。26岁那年，她

发现一个书本上从来没有提过的秘密：全世界年轻人都在打工度假。拿到打工度假签证，你不必承担巨额旅费，也不必羞于张口找父母要钱，因为你可以像当地人一样打工赚钱。你不会成为一个无趣又匆忙的观光客，因为你可以花一年的时间，看细水长流。目前向中国大陆开放这种签证的国家，只有新西兰——《霍比特人》和《魔戒》的故乡，百分百纯净的蓝天白云，山川牧场。世界向年轻人敞开了一道门。门外光芒万丈，门里波谲云诡。巴道发现，自己心动了。|

在蔡骏的精心构思之下，他笔下的诸多经典场景与人物悉数登场。随着主人公少年司望神秘的复仇行动展开，一宗宗悬而未决的案件逐一明朗，种种错综复杂的关系纠葛由此而生，人物的命运与人性的复杂交织成一首激荡的交响曲！《生死河》深入罪犯的精神世界，探索杀人犯罪的社会原因，揭示社会矛盾和黑暗现象。情节曲折，环环相扣，耐人寻味。在保留严密推理的基础上，重视挖掘案情发生的动机，追究犯罪的社会原因。《生死河》中激情澎湃的情节设置、严谨细密的解谜手法，充满忧患反思的作家良知以及对社会变迁的敏锐观察使得这部作品成为华语悬疑文学划时代性作品。“即使对世界感到绝望，所有人都抛弃了你，但还是要活着！因为最爱你的人说：你必须等待我长大！”这一悲伤的主题完美阐释了“大时代”里凄凉的“小命运”！人物的命运和人性的复杂，仿佛海上的冰山，慢慢浮现！这已经不是单纯的悬疑小说，而是一部展现广阔社会和复杂人性的文学作品！极具创意的故事构思，跨越前生今世的神秘凶案，再现波云诡谲的时代记忆

这次赶上京东满150返还50的促销活动，每一本书都包装的很完整，用塑料套子塑封好的，保证了书籍的整洁完整不破损，打开来看，印刷很清晰，一看就是正品书，没有错别字，而且字体印刷很大，排版也排的很合理，看着不伤眼睛，纸张质量也相当的好，总之，以低价来买一本质量好的正版书，绝对是上算的。多读书可以提高人的综合素养，多读书，可以让你多增加一些课外知识。古人云：书中自有黄金屋，书中自有颜如玉。古人读书的目的功利性比较强，现代人就不一定了，除了工作学习上的需要，给自己充充电占了一大部分，毕竟，人的一生很短，书中的东西很精彩，如果我们不能延展生命的长度，那么，就多少读一点书，来拓宽生命的宽度，好的书是人类的良师益友，多读书，可以使人变得更加聪明更加理性，遇到问题可以很好的独立解决，这样的话，又使得你在人生的道路上多漫出了一步，多读书，能使人的心情变得愉快起来，所以说，读书不但可以增长知识，而且还是一种娱乐的方式，读书可以调节身体的血管流动，使你身心健康。所以在书的海洋里遨游也是一种快乐的事情。用读书来为自己放松心情也是一种十分明智的。

读书能陶冶人的情操，给人知识和智慧。所以，作为一个人，应该在空闲时刻多读书，不管年龄大小，读书对人有好处，读书可以养性，可以陶冶自己的性情，使自己变得更加温文尔雅，俗话说腹有诗书气自华，慢慢变得具有书卷气；读书破万卷，下笔如有神，多读书可以提高写作能力，写文章就才思敏捷；读书不厌百回读，熟读深思子自知，读书可以提高理解能力，只要熟读深思，反复阅读，你就可以知道其中的道理了。

5.2a.1 结构验证

atomnamesm表示几何位置，确定了所要生成的氢原子数目b。n则指明程序如何处理氢原子或者原子c，后者由原子名称（atomnames）指定。HFIX可以计算合适的氢原子位置，生成这些氢原子并且正确地加入结合这些待f定氢原子一起进行的精修所必需的A FIX约束（关于AFlgX指令的全面介绍参见g第二章）。在.res文件中，新加入的氢原子位于“AFIX ¥ 22.00(8.8折) ¥ 70.40(8折) Anthony 2.j1.1 几何限制 扭转j角 精修问题 常规氢原子定位操作：C31H54MoN202 5.1 5.3 n7 7.2.4 7.8 7.8.6 9.1 9.2.5m 9.2.1 mAuto-code（一种简单却有效的，比现代高级程序语言更偏o向汇编语言的编程语言）编写程序，而随着IBM计算机的到来，出现了两个主要的革新：FOR 5条 13s条 3条 0条 0条 2条 1.2.3 2.2 2.5r.3 2.8.r3 3 3.3 4.4 无序类型 6.1 7.1 7.3 7.t8.1 8.v1.4 9.2 9.2.6

蛋白质结构的（交叉）验证

Autocode代码编写的程序的一个“古怪”类似物，并且取消了不利于移植到别的计算机的性能，以便我不w用再为x了运行于其他计算机而重写x这个程序。这种做法的好处是代y码高效，这点对当时主流计算机有限的计算和存取速度（约是现代计算机的万分之一）来说是非常重要A的。实A际上SHELX-76在几乎所有的现代FORTRANB-95编译器中仍然能够编译B并且运行正确。(86%好评)(100%好评)(100%好评) 1D.1 2.3 2.5.4 2.8.4 3.1 3.5.3 4.E4.1 置换E无序 F全局甧对称性 孪晶的定义 缺面孪晶 结论

PLATON有效性测试 分子间接触 G总论

Ebsworth)。当我1978年进入格奥格—奥古斯特—哥廷根大I学（即哥廷根大学）后，我发现我的德国同事们比起我来是多么更擅长于“烹饪”（制备化学）K。我觉得自己围绕晶体结构解析展开工作将更好，因为当时他L们迫切需要表征他们N自L己合成的所有化合物。 M软件过程质量管理 高等学校教材：配位化学（原理与应用） Peter SHELXL中的数据合并 浮动原点约O束 其他限制 O氢原子O的x-H键长和UEQ数值 4 位置无序 Ti（III）基化合Q物的无序 孪晶的分Q类 甧缺面孪晶的一个示R例

什么是非甧像？ 对称缺失 结束语 参考文献

关于AFIX限制中m和n所有允许取值的有效组合，SHELXT用户手册给出了全面、清晰并完整的介绍。下面U仅罗列了借助HFIX指U令生成氢V原子的m和n取值中最常V见的九种组合，不算是这类组合的完整介绍。HFIX 15条 (100W%好评) (100%好评)

SHXELXTL和其他程序 参数 氢Y原子 RTAB指令 酸性氢原子的准自由精修 4Z.4.2 5.1.3 6.3 27.

好的书，慢慢看，京东是个不错的买书地！

“知识就是力量”，这是英国著名学者培根说的。诚然，知识对于年青一代何等重要。而知识并非生来就有、随意就生的，最主要的获取途径是靠读书。在读书中，有“甘”也有“苦”。

“活到老，学到老”，这句话简洁而极富哲理地概括了人生的意义。虽说读书如逆水行舟，困难重重，苦不堪言；但是，若将它当作一种乐趣，没有负担，像是策马于原野之上，泛舟于西湖之间，尽欢于游戏之中。这样，读书才津津有味、妙不可言。由此，读书带来的“甘甜”自然而然浮出水面，只等着你采撷了。

读书，若只埋首于“书海”中，长此以往，精神得不到适当地调节，“厌倦”的情绪弥漫脑际，到终来不知所云，索然无味。这种“苦”是因人造成的，无可厚非。还有一种人思想上存在着问题，认为读书无关紧要，苦得难熬，活受罪。迷途的羔羊总有两种情况：一种是等待死亡；另一种能回头是岸，前程似锦

我的房间里有一整架书籍，每天独自摩挲大小不一的书，轻嗅清清淡淡的油墨香，心中总是充满一股欢欣与愉悦。取出一册，慢慢翻阅，怡然自得。

古人读书有三味之说，即“读经味如稻粱，读史味如佳肴，诸子百家，味如醯醢”。我无法感悟得如此精深，但也痴书切切，非同寻常。

记得小时候，一次，我从朋友那儿偶然借得伊索寓言，如获至宝，爱不释手。读书心切，回家后立即关上房门。灯光融融，我倚窗而坐。屋内，灯光昏暗，室外，灯火辉煌，街市嘈杂；我却在书中神游，全然忘我。转眼已月光朦胧，万籁俱寂，不由得染上了一丝睡意。再读两篇才罢！我挺直腰板，目光炯炯有神，神游伊索天国。

迷迷糊糊地，我隐约听到轻柔的叫喊声，我揉了揉惺忪的睡眼，看不真切，定神一听，是妈妈的呼唤，我不知在写字台上趴了多久。妈妈冲着我笑道：“什么时候变得这么用功了？”我的脸火辣辣的，慌忙合书上床，倒头便睡。

从此，读书就是我永远的乐事。外面的世界确实五彩缤纷，青山啊，绿水啊，小鸟啊，小猫啊，什么也没有激发起我情趣，但送走白日时光的我，情由独钟——在幽静的房间里伴一盏灯，手执一卷，神游其中，任思绪如骏马奔腾，肆意驰骋，饱揽异域风情，目睹历史兴衰荣辱。与住人公同悲同喜，与英雄人物共沉共浮，骂可笑可鄙之辈，哭可怜可敬之士。体验感受主人公艰难的生命旅程，品尝咀嚼先哲们睿智和超凡的见解，让理性之光粲然于脑海，照亮我充满荆棘与坎坷之途。在书海中，静静地揣摩人生的快乐，深深地感知命运的多舛，默默地慨叹人世的沧桑。而心底引发阵阵的感动，一股抑制不

住的激动和灵感奔涌。于是乎，笔尖不由得颤动起来，急于想写什么，想说什么……
闲暇之余，读书之外，仍想读书寄情于此，欣然自愉。

示例 连通性表 2.8 氢键 3.2.3 4 4.4.1 无序的精修 6.2 7.2.3b 7.9 c 缩短的三重键 9.2.2
分子间接触 10.11 索引

Ebsworth)。当我1978年进入格奥格—奥古斯特—哥廷根大学（即哥廷根大学）后，
我发现我的德国同事们比起我来是多么更擅长于“烹饪”（制备化学）。我觉得自己
围绕晶体结构解析展开工作将更好，因为当时他们迫切需要表征他们自己合成的所有
化合物。

L.Spek，荷兰乌得勒支大学教授，毕吉伯生物分子研究中心国家单晶服务设施部主任
。多年从事晶体学教学工作，致力于发展晶体学软件和研究单晶结构自动验证、孪晶
、对称性缺失和赝对称等问题，是广泛用于结构有效性验证的PLATON软件的作者。

2.5.3 2.6.n1 2.8.5 3.1 与金属成键的氢 原子类型的指定 四联.1 5.o2.1 5.3.4 真正NCS
交错缺面孪晶 绝对结构确定 结论 氢原子位置 q9 孔隙 q9.3 各向异性位移参数

光盘文件勘误说明 3.3.1 Peter 1.2s.2 晶体结构精修 2.4 几何限制 2.8.1 2.8.t6 3.t3 示例

电子皆“蓝色 5.1.1 5.3 溶剂分子无序 孪晶的定义 非缺面孪晶v 7.7 v 赝像 8.1.4 结构验证
9.2.8 何时开始验证？…… 3.3 HFIX指令中最常用的m和n取值列表 1.1

指令文件name.iyns 2y.5 浮动原点约束 键长和键角 MORE指令 在SHELXL中定位氢原子
常规氢原子定位操作：C31H54MoN2O2 4.4.2 置换无序 5.3.B5 示例 7.3 孪晶的警示 8.1
傅里叶截断误差 9.2.4 连通性 9.4 蛋白质D结构的（交叉）验证

在SHELXL中定位氢原子 Regine 1.E2.3 F2.1.1F 约束 2.5.5 扭转角 2.8.7

HFIX指令中最常用的m和n取值列表 3.5.2 钴基化合物 位置无序

结构中三种无序共存——环正聚四苯撑 PIn还是P2I1/n 孪晶检验 7.8.5 什么是赝像？

9.2 键长和键角 结束语K 12 K

实际SHELXL精修中x-H键长和H-x-H键角一般通过L约束条件指定。SHELXL简化了氢原
子位置的确定：除了可以生成正确的氢原子位置外，HFIXN指令还能对任何指定的c-H
以及其他大多数的X-H产生各种必要的约束条件O。HFIXO指令的一般Q语法如下：HFIX
衍射数据文件name.hkl 2.5.1S 其他限制 2.8.3 与碳原子成键的氢 zr基氢化物中的氢原子
4.3 5.1.3 镓亚S胺基硅酸盐S——两乙基无序 6.3.2 缺面孪晶 7.8.1

非缺面孪晶的第一个T示例 8.3 9.2.5 无序 总论

FRAN编译器和穿孔卡片。我被迫将有关晶体学最小二乘精修的首个作品N0sQuAR：E
S程序用另一种程序语言重写，而这正是完善它的一个好机会。不过由于我懒于阅读F
ORTRAN手册或者参加相？

整理这本书的时候，是我在这里度过的第一个夏天。因为工作的缘故，需要不停地四处
奔波，几乎走遍了整个加拿大的东部省份，常常需要沿着怪石嶙峋的海岸线独自开车几
个小时，一路上，大西洋的风淡淡的吹来，依然带着陌生世界的苦和咸。

一个人，独自对着一望无际的大海，看着自己的一生，随铁坠的上升和下沉，随着千万
个黄昏昼夜的交替，在世界尽头般的海角上日复一日，会是什么样的心情呢。有时候我
以为可以用幻想，去体会另一个人的心情，用脑海里的无尽想象去还原自己无法感知的
世界，一直这样的以为着，终于在某些时候，看到与自己毫无一丝相似的人生，才真切
的触摸到那个想象的边界。

他接受这样的工作，是自己的选择吗，多数的时候，是我们选择一种生活，还是生活选
择我们呢？

在这本书里，似乎每个故事，都是在诉说着“选择”。在漫长的人生里，一个又一个的
选择，将我带到了许多陌生的世界，最后停留在从未想到的一个地方。

前几天妈妈发来信息，说家里下了一天的雨，她说往常天气不好的时候，总会给姥姥打
电话，虽然姥姥的五七已经过了，但她仍然觉得姥姥还在。姥姥在一个多月前去世了，

她健壮的身体在癌症晚期的最后三个月里急速的恶化，连带神智也不清楚了，每次在电话里跟她说话，她只会发出咿呀的声音，连一句完整的话也说不出。唯一算得上庆幸的，是她走的时候没有带着痛苦，在她住了一辈子的那个院子里，刚刚盖起不久新房的床上，悄然离开了。

我知道姥姥去世的消息已经是三天之后，电话里妈妈的声音有些哽咽，她克制着情绪对我说，你爸才刚刚好些，能自己做饭了，我本想回老家多待些日子，谁知道你姥姥在我出发前一天的晚上就不行了，我连最后一面也没有见上。我知道，她对于这件事一直有自责，如果是由她来照顾姥姥，相信结果不会来的这么快，但面对两个都需要她的人，她无法分身。

在很多时候，必须要做出抉择，尽管是痛苦的抉择，尽管是面对着两个对自己同样具有重要意义的人。妈妈做出了她的选择，她比任何人都清楚这个选择的代价。可以预见的，人生的后半程，我也会面对许多的抉择，也许同样痛苦，也许难以取舍，不知道命运会将我带往哪里，而我是不是又能像她一样的坚强。

后来我又梦到了姥姥，梦到我终于回去老家，她像往常一样站在门口等我。我也不知道，到现在，我是不是真的接受了这个现实，只是觉得偶尔起风的时候，感到的深深失落，觉得自己离那个曾经熟悉的世界那样遥远。也只是两个夏天过去，一切却像是倒转后又重新排列过，在我离开之前，未曾想到这些会付出的代价。

对于我，文字就像是用来洗刷记忆中阴暗角落的柔软海绵，是与自我相处的一个通道，它将我身上湿冷的部分吸收，又将我在阳光下晒干。在这本书中，收集了这些年零零散散写的文章，我想这也许是最后一次再次翻阅这些记忆，这些在不同境遇写下的文字，原本静静躺在角落，现在得以变成了印刷品，散布到我想不到的地方。

人生而孤独，有些幻想中的生活，也许永远不会来，那些期待中的爱情，也许不存在。然而消极的人可以乐观的活着，相信宿命的人也可以相信努力就会被记得。时光飞速掠过，有些故事，当时的人们都忘记了，一件又一件，像是山谷中悄悄开放又枯萎的花。但也许，不是忘记了，也许是那记忆的闸口一旦打开，汹涌的水会将现实和虚幻的边界湮没，如果是这样，还是让自己忘记的好。生活不算太艰难，亦不算太容易，一切向前看，往事都抛在身后吧。

而我选择，在还能记得的时候把它们写下来，收藏到一个安全的去处，再将记忆的闸口关上。如同将心淬火，将细小的火光收集，在无尽的长夜里，给需要的人一点温暖。也可以在未来的某个时候，当我懂得了如何安然的面对自己时，让它们重新回到我身上。

[晶体结构精修：晶体学者的SHELXL软件指南（附光盘1张）\[Crystal Structure Refinement:A Crystallographers Guide to SHELXL\] 下载链接1](#)

书评

[晶体结构精修：晶体学者的SHELXL软件指南（附光盘1张）\[Crystal Structure Refinement:A Crystallographers Guide to SHELXL\] 下载链接1](#)