

رياضيات وصيغ مفيدة

Useful mathematics and formulae

لإعادة صياغة اللورد كلفن Lord Kelvin، عندما لا يمكنك التعبير عن ملاحظتك في أرقام، يكون إدراكك من النوع الهزيل وغير المقنع. إن استخدام الملاحظة العملية إضافة إلى معلوماتك يعني حتماً أننا نحتاج إلى تعبيراً رياضياً عن المشاهدات والاستنتاجات. إن الرابط بين هذين هو أيضاً رياضياً. نحن نعرض هنا بعض الرياضيات وبضع صيغ مهمة في كريستالوجرافيا الشعاع السيني.

A1.1 Trigonometry (١, ١) حساب المثلثات

يعني حساب المثلثات "قياس المثلثات" لكنه يذهب أبعد مما يعنيه الاسم. إن كثيراً من خواص المثلثات يمكن أن تلخص في حدود نسب أضلاع مثلث قائم الزاوية في الشكل رقم (١, ١). معطياً:

$$(١, ١) \quad \cos \theta = \frac{a}{c} \quad \sin \theta = \frac{b}{c} \quad \tan \theta = \frac{b}{a} \quad \text{so that} \quad \tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta}$$

يظهر تماثل دوال sine و cosine أن $\cos(-\theta) = \cos(\theta)$ وأن $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$.

نحصل على العلاقة الأخرى بين هذه الدوال من نظرية فيثاغورث:

$$(أ١, ٢) \quad a^2 + b^2 = c^2 \quad \text{معطياً} \quad \cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$$

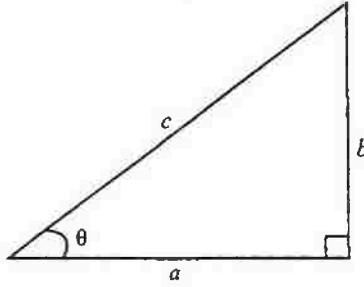
مفيداً أيضاً في الكريستالوجرافيا صيغ الزوايا المضاعفة، التي تعطى بدون اشتقاق

على هيئة:

(أ١, ٣)

$$\cos(\theta + \phi) = \cos \theta \cos \phi - \sin \theta \sin \phi$$

$$\sin(\theta + \phi) = \sin \theta \cos \phi + \cos \theta \sin \phi \quad \text{و}$$



الشكل رقم (أ١, ١). مثلث قائم الزاوية لتعريف النسب المثلثية.

تأتي هذه من دورها في معالجة معادلة الكثافة الإلكترونية للحساب العددي. على سبيل المثال يوضع $\theta = 2\pi(hx + ky)$ و $\phi = 2\pi lz$ في التعبيرات أعلاه يمكن أن نغير

إلى: $\cos 2\pi(hx + ky + lz)$

(أ١, ٤)

$$\begin{aligned} \cos 2\pi(hx + ky + lz) &= \cos 2\pi(hx + ky) \cos 2\pi lz \\ &\quad - \sin 2\pi(hx + ky) \sin 2\pi lz \end{aligned}$$

تعطي العملية المشاهدة:

$$(أ١, ٥) \quad \begin{aligned} \cos 2\pi(hx + ky) &= \cos(2\pi hx) \cos(2\pi ky) - \sin(2\pi hx) \sin(2\pi ky) \\ \sin 2\pi(hx + ky) &= \sin(2\pi hx) \cos(2\pi ky) + \cos(2\pi hx) \sin(2\pi ky) \end{aligned} \quad \text{و}$$

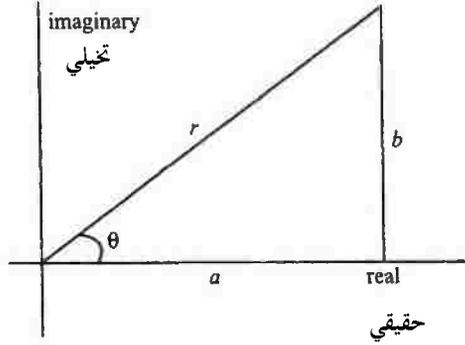
بحيث إن:

$$(أ١, ٦) \quad \begin{aligned} \cos 2\pi(hx + ky + lz) \\ = \cos(2\pi hx) \cos(2\pi ky) \cos(2\pi lz) - \sin(2\pi hx) \sin(2\pi ky) \cos(2\pi lz) \\ - \sin(2\pi hx) \cos(2\pi ky) \sin(2\pi lz) - \cos(2\pi hx) \sin(2\pi ky) \sin(2\pi lz) \end{aligned}$$

إنها تبدو وكأننا قد عملنا أشياء غاية في الصعوبة بفعل هذا. رغم هذا، فإن هذه التعبيرات عادة ما تبسط بشكل كبير بطرق مختلفة طبقاً لتماثل زمرة فراغية وتكون مفيدة في تحليل بيفرو- ليبسون Beever's- Lipson لمعادلة الكثافة الإلكترونية، التي هي كم عدد برامج الحاسوب المتعاملة مع جمع تحويلات فورير.

(أ١, ٢) الأعداد المركبة A1.2 Complex numbers

كثير من الرياضيات التي تتعامل مع عوامل تركيب وتحويلات فورير منفصلة تستخدم الأعداد المركبة. إن الأعداد المركبة هي ببساطة أرقام بمكونين بدلاً من مكون واحد. يسمى المكونين الجزء الحقيقي والتخيلي من الرقم ويمكن رسمها على مخطط ثنائي الأبعاد يسمى بمخطط ارغاند Argand plot كما هو مبين في الشكل رقم (أ١, ٢). أن الرقم المرسوم يكون له جزء حقيقي a و جزء تخيلي b ويمكن كتابته رياضياً مثل $a + ib$ حيث $i^2 = -1$. يمكنك اعتبار الثابت التخيلي i كرقم رياضي غريب، لكن الخاصية المهمة لتريعه المعطاة في الجملة السابقة يمكن الرقم التخيلي من أن يكون مضروباً أو مقسوماً بطريقة متناسقة.



الشكل رقم (٢, ١). عدد مركب $a + ib$ مرسوماً على مخطط ارجاند Argand.

إن طريقة مكافئة لتمثيل رقم تخيلي هو في الصورة القطبية أي بلغة r و θ في الشكل رقم (٢, ١). تسمى هذه المعامل وإزاحة الزاوية للرقم على التوالي. أن معرفتنا بحساب المثلاثات تسمح لنا أن نكتب:

$$(١, ٧) \quad a + ib = r \cos \theta + ir \sin \theta = r(\cos \theta + i \sin \theta) = re^{i\theta}$$

العلاقة الأخيرة المستخدمة في المعادلة (١, ٧) تكون:

$$(١, ٨) \quad \cos \theta + i \sin \theta = e^{i\theta}$$

والتي هي واحدة من أهم العلاقات المذهلة في علم الرياضيات ككل. تخبرنا نظرية فيثاغورث أن $r^2 = a^2 + b^2$ ويكون لدينا أيضاً $\tan \theta = b/a$. إن بعض خصائص الأرقام المركبة تكون مهمة لمعالجة عوامل التركيب. عملية بسيطة هي أن نأخذ العدد المركب المرافق، الذي يعني تغيير إشارة الجزء التخيلي. هكذا فإن العدد المركب المرافق للعدد المركب $a + ib$ يكتب مثل $(a + ib)^*$ ويكون مساوياً

$a - ib$. لا بد أن تكون قادراً على أن تثبت أن ضرب العدد المركب في مرافقه يعطي عدد صحيحاً الذي هو مربع المعامل:

$$(a + ib)(a + ib)^* = (a + ib)(a - ib) = a^2 - iab + iab - i^2b^2 \\ = a^2 + b^2 = r^2 \quad (أ١, ٩)$$

(أ١, ٣) موجات وعوامل تركيب A1.3 Waves and structure factors

الأشعة السينية هي موجات ولا بد أن نكون قادرين على أن نتعامل معها رياضياً. الدوال الموجية الواضحة هي جتا \cos و سينا \sin ، بحيث تكون هذه مستخدمة في وصف رياضي للموجات. إنه من المناسب بشكل كبير أن نوحّد كل من \sin و \cos إلى حد منفرد $\exp(i\theta)$ أو $e^{i\theta}$ كما هو مشاهد في معادلة (أ١, ٨). إن هذا هو السبب الرئيس لماذا تجد أسيات مركبة في معادلات عامل التركيب والكثافة الإلكترونية (معادلات (١, ١) و (١, ٢) على التوالي في الفصل الأول).

بالمثل تكون عوامل التركيب $F(hkl)$ هي تمثيل رياضي للموجات المحادة. عندما تكون متحدة لتكون صورة كثافة إلكترونية (التي تمثل إضافة موجات معاً)، تكون مساراتها النسبية مهمة. إن البناء الرياضي في الشكل رقم (أ١, ٢) يسمح لكل من سعة الموجة $|F(hkl)|$ وطورها النسبي $\phi(hkl)$ أن يمثلوا بمعامل وإزاحة زاوية لعدد مركب منفرد. يؤدي هذا إلى أن يكتب معامل التركيب بطرق مختلفة مثل:

$$F(h) = A(h) + iB(h) = |F(h)| \cos(\phi(h)) + i |F(h)| \sin(\phi(h)) \\ = |F(h)| \exp(i\phi(h)) \quad (أ١, ١٠)$$

حيث تكون معاملات (ترميزات أو أدلة) ميلر (hkl) ممثلة بواسطة مكونات المتجه h .

إن معادلة عامل التركيب، معادلة (١، ١) في الفصل الأول تظهر أن $F(h) = F^*(\bar{h})$ ، أي أن عوامل التركيب التي هي معكوسات فريدل هي أعداد مركبة مرافقة لبعضها البعض. يؤدي هذا مباشرة إلى العلاقة $F(h) \times F(\bar{h}) = |F(h)|^2$. بالإضافة، نجد أن حاصل ضرب عاملي تركيب يمكن كتابته على الصورة:

$$(١١, ١١) \quad F(h) \times F(k) = |F(h)|e^{i\phi(h)} \times |F(k)|e^{i\phi(k)} = |F(h)F(k)|e^{i(\phi(h)+\phi(k))}$$

مظهرة أن قيم عوامل التركيب تضرب والأطوار تجمع. يكون هذا مهماً عند تطبيق طرق مباشرة لتحديد الطور.

(٤، ١) المتجهات A1.4 Vectors

بوصف المتجه على أنه كمية لها قيمة واتجاه، على عكس الكمية العددية التي يكون لها قيمة فقط. هذا التعريف يكون كافياً للهدف الحالي وسوف نرى كم تكون الخواص الاتجاهية للمتجهات مفيدة. وإحدى تبعات هذا هو أن المتجهات يمكن أن تضاف معاً كما في الشكل رقم (٣، ١). يضاف المتجهين x_1 و x_{12} معاً ليعطيا الناتج x_2 ، يعبر عن هذا جبرياً مثل:

$$(١٢, ١) \quad x_1 + x_{12} = x_2$$

لاحظ أن المتجهات تكتب بشكل تقليدي بحروف ثخينة، كما في المصفوفات التي سوف نأتي إليها. لو أن المتجهين x_1 و x_2 يعطيا موضعي الذرتين في الخلية، فإن هذا

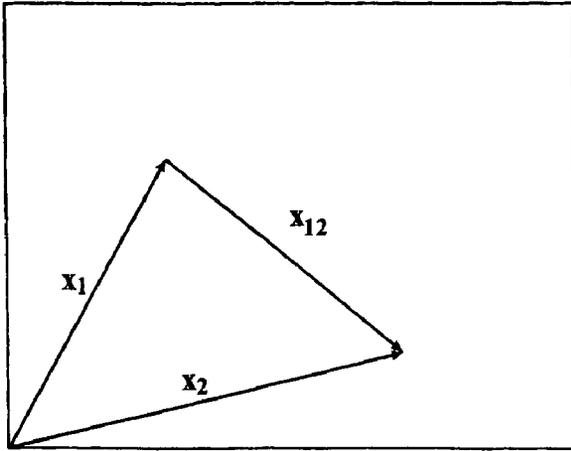
يعرف بمتجهات موضع، يسمى \mathbf{x}_{12} . ممتجه إزاحة، معطياً إزاحة الذرة 2 نسبة الذرة 1. إن إعادة ترتيب (١، ٢) يعبر عن ممتجه الإزاحة مثل $\mathbf{x}_{12} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$ وتنشأ متجهات الإزاحة هذه في وصف دالة باترسون (انظر الفصل الثامن).

في خلية وحدة التركيب يكون لمتجه الموضع \mathbf{x} المكونات (x, y, z) بحيث أن:

$$\mathbf{x} = a\mathbf{x} + b\mathbf{y} + c\mathbf{z} \quad (أ, ١٢)$$

حيث a ، b و c هي متجهات انتقال للشبكية (حواف خلية وحدة التركيب) و x ، y ، z هي الإحداثيات الكسرية للنقطة. إن ممتجه الإزاحة للذرة 2 من الذرة 1 يمكن لهذا كتابته مثل:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{12} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 &= (ax_2 + by_2 + cz_2) - (ax_1 + by_1 + cz_1) \\ &= a(x_2 - x_1) + b(y_2 - y_1) + c(z_2 - z_1) \end{aligned} \quad (أ, ١٤)$$



الشكل رقم (١، ٣). إضافة المتجهات: $\mathbf{x}_{12} + \mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$.

بالمثل، يكون موضع نقطة في حيز معكوس معطى بالمتجه \mathbf{h} ، الذي يكون له المكونات (h, k, l) بحيث إن:

$$(أ١, ١٥) \quad \mathbf{h} = \mathbf{a}^*h + \mathbf{b}^*k + \mathbf{c}^*l$$

حيث \mathbf{a}^* ، \mathbf{b}^* و \mathbf{c}^* هي متجهات انتقال للشبكية المعكوسة (حواف خلية وحدة التركيب المعكوسة) وتكون l ، k ، h هي أرقام صحيحة معطياً معاملات الحيود لمعامل التركيب $\mathbf{F}(\mathbf{h})$ عند تلك النقطة الشبكية المعكوسة. يكون الناتج (نقطي) العددي للمتجهين \mathbf{x} و \mathbf{h} هو:

$$(أ١, ١٦) \quad \mathbf{h} \cdot \mathbf{x} = hx + ky + lz$$

وهو تعبير سيكون موجوداً في كل من معادلتني عامل التركيب والكثافة الإلكترونية. إن الناتج المتجهي (التقاطعي) يكون مستخدماً في العلاقات بين الشبكية المباشرة والشبكية المعكوسة:

$$(أ١, ١٧) \quad \mathbf{a}^* = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{V} \quad \mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{V} \quad \mathbf{c}^* = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{V} \quad V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$$

حيث V هي حجم خلية وحدة التركيب، ينبغي تذكر أن:

$$(أ١, ١٨) \quad \mathbf{a} \times \mathbf{b} = ab \sin \gamma \mathbf{n}$$

حيث γ هي الزاوية بين المتجهات و n هي متجه وحدة عمودي على كل من a و b بحيث إن a, b و n هي حزمة يمينية right-handed. ينبغي أن يكون واضحاً من (١٧، ١١) أن a^* تكون عمودية على المستوى bc ؛ بالمثل يكون b^* و c^* عموديان على مستوى المستويين ac و ab على التوالي. لو أنك في حاجة إلى الاقتناع بأن المتجهات هي الطريقة الأكثر ملاءمة للتعبير عن هذه العلاقات، هنا يكون حجم خلية وحدة التركيب بدون استخدام المتجهات:

$$(١٩، ١) V = abc(1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{1/2}$$

إن زوايا الشبكية المعكوسة يمكن الحصول عليها من العلاقات (١٧، ١١)، لكن لتجنب المتاعب، فإنها تكون:

$$(٢٠، ١) \quad \cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}$$

مع تعبيرات مقابلة إلى $\cos \beta^*$ و $\cos \gamma^*$ متحصل عليها بواسطة تبادل حلقي من α, β و γ .

(٥، ١١) حساب $\sin \theta/\lambda$ لأي شبكية Calculation $\sin \theta/\lambda$ for any lattice

إن حساب زاوية براغ يكون مطلوباً عادة، على سبيل المثال لحساب عوامل تركيب أو زوايا ضبط على جهاز قياس الحيود. في النظام ثلاثي الميل، تكون الصيغة:

$$(أ١, ٢١) \quad \frac{4 \sin^2 \theta}{\lambda^2} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos \gamma^* + 2klb^* c^* \cos \alpha^* + 2lhc^* a^* \cos \beta^*$$

وتبسط هذه لشبكيات أخرى

(أ١, ٦) المحددات Determinants

سمة المحددات هي علاقات متباينة (غير متساوية) بين عوامل تركيب، تكون مطلوبة في انقلاب مصفوفة وتكون وسيلة تشخيصية مفيدة عندما يدخل تنقيحك بالمرعبات الصغرى في مشاكل. تكون المحددة أو المحدد عادة تنظيم مربع من الأعداد التي يكون لها قيمة جبرية وحيدة. تكتب محددة من الرتبة الثانية وتقيم مثل:

$$(أ١, ٢٢) \quad \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

ومحددة من الرتبة الثالثة تكون:

$$(أ١, ٢٣) \quad \begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = aei + bfg + cdh - ceg - bdi - afh$$

بصفة عامة، يمكن التعبير عن محددة في حدود محددات من رتبة أقل من الرتبة الأصل. لمحددة من الرتبة n، يعبر عن هذا مثل:

$$(أ١, ٢٤) \quad \Delta = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \Delta_j$$

حيث a_{ij} هو العدد ij من Δ و Δ_{ij} هي المحددة المكونة من Δ بفقد الصف i th والعمود j th. يمكن للجمع أن يحدث بدرجة متساوية على نحو جيد على z بدلاً من i ليعطي نفس الإجابة. رغم هذا يكون هذا مفيداً للمحددات برتبة صغيرة. إن تقييم المحددة عالية الرتبة من الأفضل عمله بواسطة طريقة جاوس للحذف (طريقة رياضية قياسية غير مناقشة هنا) لاختزال المحددة إلى شكل ثلاثي الزوايا، ثم أخذ حاصل ضرب الأعداد القطرية.

(٧، ١١) المصفوفات Matrices

تستخدم المصفوفات لعدد من الموضوعات، في كريستالوجرافيا الشعاع السيني. إنها تمثل على نحو نموذجي عناصر تماثل، تصف توجه بلورة على جهاز قياس الحيود، وتكون مستخدمة كثيراً في تنقيح بالمربعات الصغرى للتراكيب البلورية. إن المصفوفة هي ترتيب مستطيلي من أعداد أو تعبيرات رياضية ويعطي علم الجبر للمصفوفة طريقة مفيدة جداً للتعامل معها.

إن إحدى العمليات التي تكون غالباً مطلوبة هي أن نبدل المصفوفة (نقل من موضع إلى موضع آخر). يغير هذا الأعمدة مع الصفوف بحيث لو أن A هي المصفوفة:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \\ e & f \end{pmatrix}$$

فإن منقولها يكون:

$$\begin{pmatrix} a & c & e \\ b & d & f \end{pmatrix}$$

لو أن مصفوفة مربعة تكون متماثلة، فإنها تكون مساوية لمنقولها الخاص بها. يتم ضرب المصفوفة بضرب الأعداد في صف من المصفوفة الأولى بعناصر من عمود من المصفوفة الثانية وإضافة حواصل الضرب. يكون هذا العنصر في مصفوفة الضرب على نفس الصف والعمود مثل تلك المستخدمة في حسابها:

$$(أ١,٢٥) \quad \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u & x \\ v & y \\ w & z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} au+bv+cw & ax+by+cz \\ du+ev+fw & dx+ey+fz \end{pmatrix}$$

يمكن إجراء الضرب فقط لو أن عدد الأعمدة في المصفوفة الأولى يكون هو نفسه عدد الصفوف في الثانية. على سبيل المثال ربما ترغب في أن تثبت أن:

$$(أ١,٢٦) \quad \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & -2 & 1 \\ 4 & 5 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 & 11 & -7 \\ 13 & 22 & -13 \end{pmatrix}$$

يعطي حاصل ضرب مصفوفة مع مصفوفة منقولها تنتج دائماً مصفوفة متماثلة.

(أ١,٨) المصفوفات في التماثل Matrices in symmetry

يكون ضرب المصفوفة مفيداً في تمثيل عمليات التماثل على سبيل المثال، إن عملية محور 2_1 رابطاً (x, y, z) إلى $(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, -z)$ يمكن كتابتها مثل:

$$(أ١, ٢٧) \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

ويستخدم هذا الشكل من التعبير لتمثيل عمليات تماثل في حاسوب. من المفيد في بعض الأحيان أن نكون قادرين على أن نتعامل مع عمليات تماثل في حيز معكوس أيضاً. يمكن للعملية (أ١, ٢٧) أعلاه أن تكتب بلغة علم الجبر للمصفوفة مثل:

$$(أ١, ٢٨) \quad x' = Cx + d$$

حيث C هي مصفوفة 3×3 و d هي متجه انتقال. لو أن عملية تماثل زمرة فراغية يتم إجراؤها على كل البلورة، بالتعريف فإن الأشعة السينية ترى بالضبط نفس التركيب. من ثم يمكن كتابة عامل التركيب مثل:

$$(أ١, ٢٩) \quad F(h) = \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i h \cdot (Cx_j + d)) = \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i h^T Cx_j) \times \exp(2\pi i h \cdot d) \\ = F(h^T C) \times \exp(2\pi i h \cdot d)$$

هكذا فإن الانعكاسين $F(h)$ و $F(h^T C)$ يكونا مرتبطان بالتماثل. تكون قيمتهما واحدة ويكون هناك فرق طور بينهما بـ $2\pi h \cdot d$.

إن هذا أسهل في الفهم لو أننا نستمر مع المثال في (أ١, ٢٧) السابق. إن محور 2_1 هو واحد من تلك التي تحدث في الزمرة الفراغية $P2_12_12_1$. تعطى الانعكاسات المرتبطة بالتماثل التي تنتجها بواسطة:

$$(أ١, ٣٠) \quad \mathbf{h}^T \mathbf{C} = (h \quad k \quad l) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (h \quad \bar{k} \quad \bar{l})$$

هكذا فإن $F(hkl)$ يكون مرتبطاً بالتماثل إلى $F(h\bar{k}\bar{l})$. إن قيمتهما لا بد أن تكون واحدة ويكون هناك إزاحة طور بينهما معطى بالعلاقة:

$$(أ١, ٣١) \quad 2\pi \mathbf{h} \cdot \mathbf{d} = 2\pi (h \quad k \quad l) \cdot \left(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad 0 \right) = \pi(h+k)$$

يعطي وضع هذا كله معاً العلاقات $F(hkl) = F(h\bar{k}\bar{l})$ و $\phi(hkl) = \phi(h\bar{k}\bar{l}) + \pi(h+k)$.
هكذا يكون الطور هو نفسه لو أن $h+k$ تكون زوجية، لكن تزداد بقيمة π لو أن $h+k$ يكون فردي.

حتى مع التشتت غير السوي، فإن هذه العلاقات تكون صحيحة تماماً. إنه فقط عندما تكون عوامل التركيب مرتبطة بعدد مركب مرافق فإنها تتأثر بدرجة متفاوتة بواسطة تشتت غير سوي. على سبيل المثال، في $P2_12_12_1$ ، قد رأينا بالفعل أن $|F(hkl)|$ و $|F(h\bar{k}\bar{l})|$ تكون دائماً نفس الشيء، لكن $|F(hkl)|$ و $|F(h\bar{k}\bar{l})|$ سوف يتأثرا بدرجة متفاوتة، كذلك أيضاً سيكون $|F(hkl)|$ و $|F(h\bar{k}\bar{l})|$.

(أ١, ٩) انقلاب مصفوفة Matrix inversion

إن معكوس المصفوفة A هو A^{-1} التي لها خاصية أن:

$$(أ١, ٣٢) \quad AA^{-1} = A^{-1}A = I$$

حيث I هو مصفوفة محايدة (الأقطار الرئيسية تحتوي على العدد 1 وأصفار في أي مكان آخر).

إن العمليات المنفذة بضرب بمصفوفة A يمكن أن تكون غير منفذة بالضرب في معكوس المصفوفة A^{-1} . لمصفوفة مربعة برتبة 2، فإن الوصفة لهذا الانقلاب تكون:

$$(أ١،٣٣) \quad \mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \quad \text{فإن} \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad \text{لو}$$

حيث $\det(\mathbf{A})$ هي محددة المصفوفة A .

إن انقلاب مصفوفة الرتبة الثالثة يتم إحرازه بواسطة:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} \quad \text{فإن صيغة} \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad \text{لوان}$$

حيث c_{ij} هي المحددة المتحصل عليها من A بإزالة الصف i th والعمود j والضرب بواسطة $(-1)^{i+j}$. الآن يكون لدينا:

$$(أ١،٣٤) \quad \mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \mathbf{C}^T$$

إن هذه الوصفة سوف تعمل لأي رتبة مصفوفة، لكنها تكون غير كافية إلى حد كبير للرتب أعلى من ثلاثة. إن المصفوفات الأكبر يمكن أن يتم عكسها بشكل أفضل باستخدام طريقة حذف جاوش، كما ذكر سابقاً. إنه من المعتقد بشكل خاطئ أن

انقلاب المصفوفة يكون ضرورياً لحل أنظمة من معادلات خطية متزامنة. حيث إنه يكون من الأسرع أن نحل معادلات عن أن نحسب مصفوفة مقلوبة، فإن الانقلاب ينبغي أن يتم حسابه لو أنه يكون مطلوباً بصفة خاصة، على سبيل المثال لتقدير الانحرافات المعيارية للبارامترات المحددة بواسطة المعادلات.

(١٠, ١١) التفاف Convolution

إن الالتفاف هو عملية تؤثر في حياة كل العلماء. حيث إنه لا يوجد جهاز قياس أو رصد تام، فإن هذا سوف يؤثر على الجودة التي ترصد من قبل أن يتم الرصد. على سبيل المثال يغير المتحدثون بصوت مرتفع الإشارة التي تصل إليهم من المكبر، هكذا يتم تغيير (قليلاً) الصوت الذي نسمعه. إن الوصف الرياضي لهذا يسمى الالتفاف. إنه يظهر أيضاً في رياضيات الكريستالوجرافيا رغم أن كثير من الناس يصنفوا على أنهم كريستالوجرافيون بدون معرفة الكثير عن الكريستالوجرافيا.

إن المثال الأبسط على الالتفاف هو وصف بلورة. إن التفاف نقطة شبكية مع أي شيء على الإطلاق، مثل خلية وحدة تركيب وحيدة، يترك ذلك الشيء بدون تغيير. من ناحية ثانية فإن التفاف نقطي شبكية مع خلية وحدة تركيب يعطي خلتي وحدة تركيب، واحدة على موقع كل نقطة شبكية. إن التركيب الكامل لهذا يمكن وصفه على أنه التفاف خلية وحدة تركيب واحدة مع الشبكية البلورية ككل. يبدو هذا أن يكون تعقيد غير ضروري باستثناء التلازم الجوهري للالتفاف مع تحولات فوريير.

تقول نظرية الالتفاف في الرياضيات "يعطى تحول فوريير لحاصل ضرب دالتين بالتفاف تحولات فوريير الخاصة لهما". هكذا لو أن $c(x)$ ، $f(x)$ و $g(x)$ هي تحولات فوريير من $C(S)$ ، $F(S)$ و $G(S)$ على التوالي، فإن النظرية يمكن التعبير عنها رياضياً مثل:

$$c(x) = f(x) * g(x) \quad \text{فإن} \quad C(S) = F(S) \cdot G(S) \quad \text{لو} \quad (١١, ٣٥)$$

حيث * هي عامل الالتفاف.

يقود هذا إلى وصف نموذج حيود الشعاع السيني للبلورة على أنه حاصل ضرب الشعاع السيني المشتت من خلية وحدة تركيب وحيدة والشبكية المعكوسة، المشاهد في النموذج

$$\begin{array}{rcccl}
 \text{خلية وحدة} & & \text{شبكية} & & \\
 \text{تركيب} & \bullet & \text{بلورية} & = & \text{بلورة} \\
 \uparrow \text{F.T.} & & \uparrow \text{F.T.} & & \uparrow \text{F.T.} \\
 \text{نموذج تشتت} & & \text{شبكية} & & \\
 \text{خلية وحدة} & \times & \text{معكوسة} & = & \text{نموذج حيود الشعاع} \\
 \text{تركيب} & & & & \text{السيني} \\
 & & & & (١١, ٣٦)
 \end{array}$$

إن هذه العلاقة تسمح لنا أن نتعامل مع خلية وحدة تركيب واحدة بدلاً من ملايين الخلايا التي تصنع البلورة الكاملة.

قاموس كريستالوجرافي قصير

A short crystallographic dictionary

نحن لا نعتزم أن نكتب كتاباً عن كريستالوجرافيا الشعاع السيني؛ توجد بالفعل كتب جيدة منها. رغم ذلك يكون من المفيد في بعض الأحيان أن نكون قادرين على أن ننظر إلى بعض المصطلحات الفنية بشكل سريع. يوجد هنا بعض ما قد يمكنك أن تلتقي به مصادفة في ترتيب أبجدي. المصطلحات بالنمط الشخين في المتن قد تكون موجودة كمدخلات أخرى.

امتصاص Absorption

تمتص جميع المواد الأشعة السينية عند المرور خلال لوح من مادة بدون انحراف، تختلف شدة الأشعة السينية مثل $I_t = I_0 \exp(-\mu t)$ حيث t هي سمك المادة المنفذ و μ هو معامل الامتصاص الخطي. تعتمد قيمة μ على التكوين الذري للمادة وطول موجة الشعاع السيني. بصفة عامة تزداد μ مع الطول الموجي والعدد الذري. إن إهمال الامتصاص يضيف خطأ منهجي لنتائج تحديد التركيب البلوري. قد يكون هذا مميزاً في حالات.

حافة امتصاص Absorption edge

حافة امتصاص هي تغير مفاجئ في قيمة معامل الامتصاص الخطي لذرة من نوع ما كدالة لطول الموجة. على جانب الطول الموجي الطويل من الحافة يكون الامتصاص منخفضاً. عند تقصير الطول الموجي، تزداد طاقة الشعاع السيني، ليسمح بإثارة الذرة إلى مستوى طاقة إلكترون أعلى. يُظهر هذا نفسه في زيادة مفاجئة في الامتصاص.

متباين الخواص Anisotropy

متباين الخواص هو تغير بارامتر فيزيائي مع الاتجاه. هكذا تصف بارامترات إزاحة أنيزوتروبية تغير الاهتزازات الحرارية الذرية مع الاتجاه. مثال آخر هو امتصاص لبلورة لا كروية.

تششت غير سوي Anomalous scattering

عندما يكون تردد الشعاع السيني قريباً من تردد الرنين للإلكترون، تكون الأشعة السينية مشتتة بـ $\pi/2$ راديانات خارج الطور مع أشعة سينية مشتتة من إلكترونات أخرى في نفس الذرات وذرات أخرى في البلورة. يحدث هذا عندما يكون الطول الموجي قريب إلى حافة امتصاص للذرة. تكون تأثيرات التداخل بحيث أنها تغير بشكل تفاضلي أو تبايني قيم معامل التركيب مرتبطة بعلاقة مثل $|F(\mathbf{h})|$ و $|F(-\mathbf{h})|$ أي قانون فريدل. إن حجم التأثير يكون معتمداً على الطور، بحيث يمكن استخدامه لتحديد طور. أن استخدامه الأكثر شيوعاً في الكريستالوجرافيا الكيميائية هو لتحديد التشكيل المطلق لجزيء كيرالي.

قانون براغ Bragg's law

يعطي قانون براغ الظروف الهندسية التي تحتها يمكن لحزمة محادة أن تكون مرصودة. يبين الشكل رقم (١,٧) في الفصل الأول أشعة محادة من مستويات شبكية بلورية، ولكي نحصل على تداخل بناء، لا بد لفرق المسار أن يكون عدد صحيح أو كامل من أطوال موجية. من ثم تؤدي مناقشة زاوية هندسية إلى قانون براغ:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

حيث تعرف θ على أنها زاوية براغ، λ هو الطول الموجي للشعاع السيني، و d هي مسافة الفصل. يمكن للكمية n أن تؤخذ دائماً على أنها الوحدة بتصنيف مناسب لمعاملات (أدلة) الحيود بعامل مشترك من n .

شبكة برافيس Bravais lattice

تكون خلية وحدة التركيب مكررة على شبكية فراغية ثلاثية الأبعاد منتظمة لتعطي التركيب الكامل. يعطي هذا نقطة شبكية واحدة لكل خلية وحدة تركيب، ينتج ما يسمى خلية أولية. رغم هذا فإنه يكون من المناسب غالباً للحسابات ولتمثيل النتائج أن يعكس تماثل خلية وحدة التركيب تماثل البلورة. يجعل هذا من الضروري في بعض الأحيان أن يكون له أكثر من نقطة شبكية لكل خلية، لينتج خلايا وحدة تركيب مركزية (مركزة الوجه أو مركزة الجسم). يكون هناك تماثلات 14 خلية وحدة تركيب (شبيكات برافيس) التي تنشأ من احتمالات التمرکز المختلفة في كل نظام بلوري.

النظام البلوري Crystal system

يكون هناك سبعة أنظمة مقابلة للتماثلات السبع المختلفة من شبكات برافيس أولية. كل واحدة تقابل قيود مختلفة على عوامل خلية وحدة التركيب:

لا توجد قيود	ثلاثي الميل triclinic
$\alpha = \gamma = 90^\circ$	أحادي الميل monoclinic
$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	متعامد الأضلاع orthorhombic
$a = b, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	رباعي tetragonal
$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma$	معيني (موشور سداسي منتظم) rhombohedral
$a = b, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	سداسي hexagonal
$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	مكعبي cubic

بعض الأفراد سوف يدعوا بأن هناك ست أنظمة بلورية فقط بسبب أن النظام المعيني يمكن دائماً أن يمثل على شبكة سداسي ممرکز.

معاملات (أدلة) حيود Diffraction indices

كل حزمة محادة (انعكاس) في نموذج حيود ثلاثي الأبعاد يُعرف بثلاثة أرقام صحيحة h, k, l التي هي دلالات الحيود وتصف الاتجاه الذي فيه تحدث هذه الحزمة المنعكسة. هكذا، يكون متجه الموضع لكل انعكاس في الشبكة المعكوسة هو $ha^* + kb^* + lc^*$. يكون هذا المتجه عمودياً على المستويات البلورية ليكون باعثاً على الحيود وتكون قيمته هي المعكوس لمسافة الفصل بين المستويات.

تموج حيود Diffraction ripple

تموج من كثافة إلكترونية تحيط قمة ذرية (بصفة خاصة ذرة ثقيلة) بسبب التحليل المحدود للخريطة.

تماثل الحيود Diffraction symmetry

تماثل الحيود هو تماثل نموذج الحيود ويكون موصوفاً بزمرة لاوي.

تحول فورير منفصل Discrete Fourier transform

إن تحول فورير منفصل هو تحول فورير منفذ على دالة منفصلة. يكون هذا هو الحال دائماً باستخدام حاسوب رقمي لتنفيذ الحسابات. إن نموذج حيود الشعاع السيني لبلورة هو منفصل بطبيعته. إن الكثافة الإلكترونية، رغم أنها دالة منفصلة، تكون دائماً ممثلة على صف من نقاط، مما يجعله منفصلاً.

متماكب بصري (متشاكل مرآوي) Enantiomorph

إن تركيباً بلورياً معكوساً خلال الأصل (نقطة الأصل) أي $\rho(x)$ تصبح $\rho(-x)$ ينتج متماكب بصري. لا يغير هذا قيم عوامل التركيب، لكن تكون الأطوار مرتبطة بواسطة $\phi(h)$ لتصبح $-\phi(h)$. إن الجزئي والمتماكب البصري له يكونان مرتبطين بعملية تماثل مثل $\bar{1}$ أو m .

إخماد Extinction

يمكن تمييز نوعين من الإخماد، يعرفا بإخماد أولي وإخماد ثانوي، لكن تكون آليتهما مختلفتين نوعاً ما. ليس من السهل أن تميز بينهما عملياً. لا تعطي كل الكتب وصف مقنع أو لا تتفق حول من يكون من، من ثم كن حريصاً!

إخماد أولي Primary extinction

بسبب الأخطاء في الشبكية البلورية، يمكن اعتبار معظم البلورات مكونة من تركيب فسيفسائي لبلورات دقيقة تامة تكون هذه البلورات الدقيقة على اتجاهات مختلفة قليلاً ولهذا سوف تحدث حيود عند زوايا مختلفة قليلاً. يسمح لهذا للأشعة السينية المحادة

أن تترك البلورة بدون كونها محادة مرة ثانية. لو أن الانتشار الزاوي للشبكية يكون صغيراً للغاية، فإن احتمالية كون الأشعة السينية معاد حيودها قبل أن تترك البلورة يتزايد بشكل كبير. إن النظرية الحركية kinematic البسيطة لحيود الأشعة السينية التي تكون مستخدمة بشكل عام من ثم لا تكون مطبقة وتكون الشدات المقاسة مختزلة بشكل ضخم عن قيمتها المتوقعة نسبة إلى $|F|^2$. في حالة مفرطة تكون الشدة المقاسة متناسبة بشكل أقرب كثيراً إلى $|F|$. تكون النظرية (الديناميكية) لحيود الشعاع السيني من ثم في حاجة إلى أن تستخدم، لكن تكون معقدة إلى أبعد حد.

إخماد ثانوي Secondary extinction

في بلورة ذات إحادة قوية، تفقد حزمة الشعاع السيني طاقة على مسارها خلال البلورة بسبب الأشعة الكثيفة المحادة منها. يكون التأثير هو زيادة واضحة في الامتصاص للبلورة بمقدار يتناسب مع شدة الحزمة المحادة. هكذا يكون تأثيره الأكبر على الانعكاسات القوية.

تحول فوريير سريع Fast Fourier transform

تعرف نظام (خوارزمية) حاسوب الذي ينفذ تحول فوريير منفصل بتحليل التعبير الرياضي إلى عوامل، وبالتالي زيادة كفاءة الحساب، بتحول فوريير السريع (FFT). هناك طرق عدة لإنجاز التحليل، لكن ينتج عن كل طريقة حساب زمن متناسب مع $N \log(N)$ حيث N هو طول التحول. بدون أي تحليل لعوامل، يكون الزمن متناسباً مع N^2 . أول نظام حساب FFT خوارزمية كان مكتشفاً من قبل جاوس Gauss.

تحول فوريير Fourier transform

في حيود فراوهوفر Fraunhofer، تكون العلاقة الرياضية بين نموذج الحيود والهدف الذي ينتجه كتحويل فوريير. في غياب إخماد، يكون نموذج حيود الشعاع السيني

هو تحول فوريير لتوزيع الكثافة في البلورة. تكون الكثافة الإلكترونية هي تحول فوريير المعكوس لنموذج الحيود.

إحداثيات كسرية Fractional coordinates

يعطي موضع نقطة داخل خلية وحدة تركيب بالمتجه $x = ax + by + cz$ حيث a, b, c هي متجهات انتقالية للشبكية و x, y, z هي إحداثيات كسرية، تسمى هكذا بسبب أنها دائماً يمكن أن تقع في المدى 0-1.

حيود فراونهورفر Fraunhofer diffraction

إن حيود فراونهورفر هو ذلك الذي تكون فيه كل رتب الحيود منفصلة. يحدث هذا عادة على مسافة لا نهائية من هدف الإحادة. في حال حيود الشعاع السيني، تكون رتب الحيود مفصولة عند كل المسافات خارج البلورة بسبب تأثيرات شبكية. يكون نموذج حيود الشعاع السيني هكذا مثال لحيود فراونهورفر.

قانون فريدل Friedel's law

في غياب تشتت غير سوي، تكون الشدات في نموذج الحيود مرتبة حول البلورة. خاصة العلاقة بين $F(h)$ و $F(-h)$ بحيث أن $|F(h)| = |F(-h)|$ و $\phi(h) = -\phi(-h)$. يكون هذا هو قانون فريدل ويطلق على الانعكاسين $F(h)$ و $F(-h)$ بمعكوس فريدل أو زوج فريدل. يتم كسر قانون فريدل عندما يحدث تشتت غير سوي في بلورة لا تماثلية مركزياً.

زمرة لاوي Laue group

تكون زمرة لاوي في بلورة هي تماثل الزمرة النقطية للشدات المنعكسة. بسبب قانون فريدل، يكون تماثل الشدات عادة متماثلاً مركزياً. إن زمرة لاوي لهذا هي زمرة نقطية للبلورة. بمركز تماثل يضاف إذا لم يكن هناك تماثل موجود أصلاً. هناك 11 زمرة لاوي تقابل 11 زمرة نقطية كريستالوجرافية متماثلة مركزياً.

معامل لورنتز Lorentz factor

عندما تكون شدة الشعاع السيني مقاسة من بلورة متحركة، فإن الفترة الزمنية التي تبقى فيها البلورة في موضع الإحادة لا بد أن يؤخذ في الاعتبار. يعمل هذا بواسطة عامل لورنتز. إنه يعتمد على هندسة الحيود وزاوية براغ.

تصحيح Lp correction Lp

إن عامل لورنتز وعامل الاستقطاب يتحدا عادة داخل عامل واحد الذي يكون مستخدماً لتصحيح الشدات المقاسة لهذين التأثيرين. يطلق على هذا تصحيح Lp.

تماثل مقاسي Metric symmetry

يطلق على تماثل الشبكية بالتماثل المقاسي. إنه قد يكون أكبر من ذلك الخاص بالزمرة الفراغية لو أن حواف خلية وحدة التركيب تكون بالمصادفة متساوية أو أن الزوايا قد يحدث أنهما تكون 90° أو 120° .

معاملات (ترميزات أو أدلة) ميلر Miller indices

حزمة من ثلاث معاملات، مصنفة h, k, l . تستخدم في علم البلورات الكلاسيكية لوصف اتجاه أوجه بلورة. إنها تتطابق مع معاملات الحيود $n = 1$ في معادلة براغ. يطمس الاستعمال شائع الاختلاف بين الاثنين.

الزمرة النقطية Point group

الزمرة النقطية هي حزمة كاملة منسجمة ذاتياً من عناصر التماثل التي تصف التماثل حول نقطة. تكون العناصر الممكنة في تماثل بلوري هي محاور الدوران 1، 2، 3، 4، 6 ومحاور الانقلاب 1، 2، 3، 4 و 6. تكون $\bar{2}$ هو مستوى مرآوي ويكتب غالباً على أنه m . يمكن لعناصر التماثل هذه أن تتحد في 32 طريقة مختلفة، معطية 32 زمرة نقطية بلوري.

عامل استقطاب Polarization factor

إن الأشعة السينية الناتجة بواسطة تشتت طومسون Thomson scattering تشع (تنبت) متباين الخواص من الإلكترون وتكون أيضاً مستقطبة. ينتج عن هذا أن الأشعة السينية المحادة ستكون مستقطبة ويؤثر هذا أيضاً على شدتها. يعتمد عامل الاستقطاب على زاوية براغ وأيضاً على مصدر الأشعة السينية، فيما لو أنها تكون ناتجة بواسطة أنبوبة محتومة أو شعاع سنكروتروني أو قد مرت خلال موحد اللونية monochromator.

شبكة معكوسة Reciprocal lattice

إن نموذج حيود الشعاع السيني هو دالة منفصلة توجد على شبكة ثلاثية الأبعاد منتظمة، الشبكة المعكوسة. يمكن اعتبار الشبكة المعكوسة على أنها تحول فورير للشبكة البلورية. يكون متجه الشبكة المعكوسة $ha^* + kb^* + lc^*$ عمودي على المستويات البلورية محدثاً انعكاس hkl وله قيمة تكون معكوسة إلى مسافة الفصل بين المستويات. إن بارامترات الشبكة المعكوسة يمكن حسابها من تلك للشبكة البلورية باستخدام صيغ معطاة في ملحق ١.

انعكاس ريننجر Renninger reflection

لو أن البلورة تكون في اتجاه لينتج حزمتين متزامنتين أو أكثر فإن كل حزمة محادة تكون في الاتجاه الصحيح لكي تعمل كحزمة أولية لينتج حزمة محادة جديدة. على سبيل المثال، لو أن البلورة تنتج انعكاسات hkl و $h'k'l'$ في نفس الوقت، فإنها قد تعطي أيضاً انعكاساً ظاهرياً هو انعكاس $h-h'$ ، $k-k'$ ، $l-l'$ حتى لو أن ذلك هو غياب منهجي. يكون هناك تبادل ديناميكي للطاقة بين الحزم المختلفة بداخل البلورة الذي يمكن أن يؤدي إلى قياس غير دقيق جسيم للشدة الصحيحة لأي واحد منها عند حدوث هذا التأثير.

التحليل Resolution

التحليل هو قياس للقدرة على أن نميز بين سمات متجاورة في خريطة كثافة إلكترونية. بالاتفاق، يمكن تعريفه على أنه مسافة الفصل للمستوى الأدنى المعطاة في قانون براغ لحزمة خاصة من بيانات حيود شعاع سيني.

عامل التشتت Scattering factor

يعطي عامل التشتت الذري كمية الشعاع السيني المشتتة بواسطة ذرة منفردة كدالة لزاوية براغ. يعرف على أنه عامل شكل في شمال أمريكا. إنه يقيم على أنه تحول فوريير لتوزيع الكثافة الإلكترونية للذرة، التي بدورها يتم الحصول عليها من حسابات ميكانيكية كمية.

زمرة فراغية Space group

إن التشكيل المؤلف من زمرة نقطية بلورية مكررة على شبكية برافيس هو زمرة فراغية. بعض اتحادات من زمرة نقطية وشبكية برافيس تكون منسجمة ذاتياً. يتم تصميم

تمثل الزمرة النقطية لتشمل مكونات انتقال بالإضافة إلى دورانات وانقلابات ولا يجب بالضرورة أن تتقاطع عند نقطة. تصف زمرة فراغية التماثل لتركيب ذري من البلورة. العدد الممكن من الزمرة الفراغية هو 230.

عامل التركيب Structure factor

توجد عوامل عديدة تؤثر على شدة الأشعة السينية في نموذج الحيود. أحدهما يعتمد على التركيب البلوري فقط ويطلق عليه عامل التركيب. إنه يكون ممثلاً بالرمز $F(h)$ حيث h هي متجه شبكية معكوسة، ويستخدم لوصف نموذج حيود الشعاع السيني. يمكن أن يعبر عنه في حدود المحتويات من خلية وحدة تركيب منفردة طبقاً للمعادلة (١,١) في الفصل الأول.

غياب منهجي Systematic absence

إن فئات معينة من انعكاس قد تكون غائبة من نموذج الحيود بسبب تأثيرات تماثل زمرة فراغية. تعرف هذه على أنها غيابات منهجية وتكون حاسمة لتحديد تماثل الزمرة الفراغية. إنها تحدث متى تكون خلية وحدة التركيب ممركرة أو يكون لعناصر التماثل مكونات انتقالية. يسمح هذا بحدوث تداخل هدام للأشعة السينية بطريقة منهجية للتأكيد بأن عوامل تركيب معينة لا بد أن يكون لها مقادير صفر. مع خلية وحدة تركيب ممركرة، تحدث الغيابات المنهجية في جميع أنحاء الشبكية المعكوسة. تعطي مستويات انزلاق غيابات منهجية في طبقة الصفر من الشبكية المعكوسة موازية لمستوى الانزلاق. يعطي محور لولبي غيابات منهجية على طول صف الشبكية المعكوسة المركزية موازية للمحاور.

الحركة الحرارية Thermal motion

يظهر اهتزاز الذرات كانتشار خارجي للكثافة الإلكترونية عندما يتم أخذ متوسطها فوق البلورة الكلية. يغير هذا فعالية تشتت الشعاع السيني من كل ذرة الذي يمكن نمذجته بضرب عامل التشتت الذري بعامل حرارة أيزوتروبي $\exp(-B \sin^2 \theta / \lambda^2)$. يكون البارامتر B مرتبطاً بمتوسط مربع الإزاحة الذرية U بالعلاقة $B = 8 \pi^2 U$ وله وحدات \AA^2 . يكون من الشائع أن تستخدم نموذج انيزوتروبي للاهتزازات التي تتطلب ست بارامترات إزاحة بدلاً من استخدام U المنفردة في وصفه. إن تأثير الاهتزازات على نموذج الحيود هو أن تختزل شدته عند زوايا براغ كبيرة. يُختزل هذا التأثير عندما تنفذ تجربة الحيود عند درجة حرارة منخفضة.

تشتت طومسون Thomson scattering

الميكانيكية أو الآلية التي بواسطتها تكون الإلكترونات مشتتة بواسطة الإلكترونات قد تم فحصها بنجاح بواسطة طومسون J.J. Thomson، من ثم سميت الطريقة باسمه، وصف أكثر معطى في الفصل الأول.

رسم ولسون Wilson plot

رسم $\ln(|F|^2) / \sum f^2$ ضد $\sin^2 \theta / \lambda^2$ الذي يستخدم لتحديد القيمة المتوسطة لعامل درجة الحرارة. ولوضع البيانات المرصودة على مقياس مطلق تقريبي.

إجابات للتمارين

Answers to exercises

الفصل الثاني

(٢،١) ١- يكون أروماتي والمذيب المناسب أكثر من المرجح أن يكون أروماتي أيضاً، لهذا فإن التولوين (ب) يصبح ملائماً. إنه أيضاً يذوب في الإيثانول (ج) وثنائي إيثيل أثير (ز).

٢- يحتوي على مستبدلات نيترو وحمض كربوكسيلي قطبي بالإضافة إلى حلقتها العطرية. إنه يذوب في مذيبات قطبية متوسطة مثل الإيثانول (ج). إنه يذوب أيضاً في حمض الخل.

٣- يحتوي على عدد كبير من مجموعات هيدروكسيل، لتجعله غير ذائب بدرجة كبيرة في مذيبات عضوية لكن سريع الذوبان في الماء (أ).

٤- يكون أيوني ولهذا يكون عالي الذوبان في الماء (أ) وشحيح الذوبان في الإيثانول (ج).

٥- يحتوي على سلسلة هيدروكربون طويلة ومجموعة حمض كربوكسيلي. يكون ذائباً في مذيبات بقطبية متوسطة مثل ثنائي كلور ميثان (د)، أسيتون (هـ)، وثنائي إيثيل أثير (ز).

٦- يحتوي على مستبدلات عطرية والتولوين (ب) سيصبح مذيب جيد.

٧- إنه مركب عضو معدني وثنائي كلوروميثان (د) يكون عادة مذيب جيد لمثل تلك الأصناف.

٨- إنه هيدروكربون مشبع ثنائي الحلقة والذي يملك قطبية صغيرة جداً. يكون المذيب الأفضل هو الهكسان- العادي (n-hexane) (و)، والذي يكون غير قطبي مماثل.

(٢,٢) (أ) هذه البلورة من المحتمل أن تكون صغيرة جداً لتعطي بيانات حيود مفيدة على مقياس حيود رباعي الحلقات متصل بمصدر أنبوبة محتومة ملائمة. باستخدام مقياس حيود كاشف مساحة، مصدر أكثر قوة أو كلاهما سوف يحسن فرص النجاح.

(ب) هذه العينة قد تحتوي على بلورات تنتمي إلى نظام بلورات مكعبي. هل يوجد دليل داعم لهذا مثل علم تشكل البلورات؟ مثل تلك المركبات غالباً لا تكون مكعبة ومن المحتمل أنك تنظر إلى شظايا من زجاج مكسور أو أن بلورات شائبة من نظام مكعبي مثل كلوريد الصوديوم في حاجة إلى اعتبارها.

(ج) إن هذا مقترح بشكل عالي بأن البلورة تكون تجمع من بلورات أصغر، لترجمتها بأنها عديمة الجدوى لتحديد تركيب. يمكن إثبات هذا تصويرياً على مقياس حيود رباعي الحلقات، أو بالنظر على بضع إطارات من بيانات كاشف مساحة.

(د) عندما تشاهد بلورات الرباعي على طول محورها C الوحيد فإنها لا تنفذ الضوء المستقطب. رغم ذلك فإنها تفعل هذا عندما تشاهد على طول أي اتجاه آخر. في هذه الحالة فإن الوجه المربع من كل بلورة يكون متعامداً على محور c الوحيد.

(هـ) هذا السلوك البصري يقترح أن يكون للبلورة انتشار فيسيفسائي عالٍ وسوف تعطي انعكاسات باتساعات مسح واسعة. وبيانات الحيود قد تكون بجودة رديئة. من الأفضل أن تجمع البيانات على مقياس حيود كاشف مساحة. (و) هذه البلورة من الواضح أنها ليست وحيدة وينبغي عليك بحث العينة للحصول على بلورة أفضل.

الفصل الثالث

(٣، ١) (أ) CHBrClF : C_1 أو ١ (كل الذرات لابد أن تقع على أي عنصر تماثل).

(ب) HOCl : C_s أو m - لاحظ أن أي جزيء بثلاث ذرات لابد أن يكون له

مستوى تماثل!

(ج) C_2H_4 : D_{2h} أو mmm .

(د) C_2H_2 : C_{2h} أو C_{2v} .

(هـ) $\text{E-1,2-difluoroethane}$: C_{2v} أو $mm2$.

(و) $1R,2S\text{-ClFHC-CHFCI}$: $C_1(\bar{1})$ مترنحة، $C_s(m)$ مطابقة، $C_1(1)$ بينهما.

(ز) $1R,2R\text{-ClFHC-CHFCI}$: $C_1(2)$ في أي تطابق مقترح.

(ح) $\text{tetrachlorospirane}$: $D_2(222)$ كيرالي ولا قطبي.

(٣، ٢) تكون عناصر التماثل في البلورات كالاتي:

(أ) لا يوجد عناصر التماثل.

(ب) مركز انقلاب ($\bar{1}$) عند مركز البلورة؛ لا توجد عناصر تماثل أخرى.

(ج) محور ثنائي النقلة أفقياً عبر الصفحة.

(د) مستوى مرآوي m عمودي على الصفحة، رابطاً الوجهين مرقمة m .

(هـ) مستوى مرآوي رابطاً الوجهين m و c : محور ثنائي النقلة خلال الوجه b ؛
(1) عند مركز البلورة.

(و) ثلاث محاور ثنائية النقلة: واحدة إلى أسفل الصفحة c ، واحدة تربط
وجهين m ، وواحدة عبر الصفحة خلال b .

(ز) مستويين مرآويين: واحد رابطاً الوجوه m ، وواحد يحتوي على الحافة
الأعلى للبلورة؛ محور ثنائي النقلة عند تقاطع هذين.

(ح) ثلاث محاور ثنائية النقلة: واحد إلى أسفل الصفحة، واحد خلال a وواحد
خلال b ؛ مستوى مرآوي عمودي على كل من هذين: (1) عند مركز
البلورة.

$$Z = \rho N_A V / M \quad (3, 3)$$

(أ) الميثان (CH_4) [عند 70K]: $V = 215.8 \text{ \AA}^3$ ؛ $\rho = 0.492 \text{ g cm}^{-3}$ ؛ $M = 16.04$ ؛ $Z = 4$.

(ب) الألماس (C): $V = 45.38 \text{ \AA}^3$ ؛ $\rho = 3.512 \text{ g cm}^{-3}$ ؛ $M = 12.01$ ؛ $Z = 8$.

(ج) الجلوكوز ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$): $V = 764.1 \text{ \AA}^3$ ؛ $\rho = 1.564 \text{ g cm}^{-3}$ ؛ $M = 180.1$ ؛ $Z = 4$.

(د) Bis(dimethylglyoxime)platinum (II) ($\text{C}_8\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_4\text{Pt}$): $V = 1146 \text{ \AA}^3$ ؛
 $Z = 4$ ؛ $M = 425.3$ ؛ $\rho = 2.46 \text{ g cm}^{-3}$.

الحجم (\AA^3) لكل ذرة غير هيدروجين: (a) $215.8/4 = 54$ ؛ (b) $45.35/8 = 5.7$ ؛ (c)
(d) $1146/68 = 16.9$ ؛ $764.1/48 = 15.9$.

(a)، (b) تلائم بصعوبة تعريف الجزيئات العضوية والعضو معدنية الممثلة!

(٣، ٤) $V = 664.5 \text{ \AA}^3$. لكرة من بيانات عند تحليل Γ ، $N = \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right) / (1/V) = 5436$. بافتراض أن الوحدة اللاتماثلية هي الثمن من هذا ويكون العدد المقدر من البيانات هو 680. في الحقيقة، سوف يكون أكثر حيث أن كل البيانات (خاصة $hk0$) لا تكون عامة. (٣، ٥) ينبغي للأفكار الآتية أن تساعدك في التعرف على خلية وحدة التركيب في كل حالة.

(أ) هذا النموذج هو $p1$ ، بدون تماثل ماعدا تماثل انتقالي صحيح، رغم مركز الانقلاب التقريبي (كما تظهر المسارات الحلزونية) بسبب أنها تتحول جميعها في نفس الاتجاه. قد تختار خلية وحدة تركيب من أشكال متنوعة بالبداية على مستطيل أسود اختيار متجاورين ومن ثم إغلاق بالرابع. تكون الوحدة اللاتماثلية هي الخلية الأصلية. يمكن اختبار الشكل المستطيل من الخلية، لكنه يكون ضعف حجم الخلية الأولية وليس هناك أسباب تماثل لاختيارها.

(ب) يكون هناك مستوى مرآوي عبر الصفحة (خلال عنصر الزخرفة الرئيس)، وخطوط انزلاق إلى أعلى وإلى أسفل الصفحة. تكون زمرة للمستوى التالي هي $p2mg$. يتم اختبار نقطة الأصل بطريقة مناسبة على نقطة دوران بمحور ثنائي النقلة، مثل المنتصف بين مثلثين أسودين. تكون خلية وحدة التركيب مستطيله والوحدة اللاتماثلية هي ربعها.

(ج) هذا النموذج من الواضح أنه قطبي، حيث أن الدوران لأعلى يكون مختلفاً عن الدوران لأسفل، ومن ثم فلا يحتوي على دورانات ثنائية النقلة. يكون هناك كل من خطي مرآة وانزلاق أعلى الصفحة، وتكون زمرة المستوى هي cm . تكون نقطة الأصل في أفضل موضع على واحدة من الخطوط المرآوية وتختار خلية وحدة تركيب مستطيل من هذا. تكون الوحدة اللاتماثلية هي ربع خلية وحدة التركيب.

(د) هذا النموذج من الواضح أنه غير قطبي. إنه يحتوي على نقطتي دوران ثنائي النقلة (مثل مراكز انقلاب في بعدين)، على سبيل المثال، على النقاط المشار إليها بستة صفوف! يمكن لخلية وحدة تركيب مستطيله إن تحدد من هذا النقطة. إن لها خطوط مرآة وانزلاق في كلا الاتجاهين والزمرة النقطية $c2mm$. تكون الوحدة اللاتمامية هي ثمن الخلية.

(٣, ٦) (أ) غيابات نظامية تشير إلى انزلاق $a \perp n$ وانزلاق $b \perp a$. يتم أثبات هذا بتوزيعات الشدة. يشير النطاق المركزي $hk0$ إلى دوران ثنائي النقلة $\parallel c$. هكذا يكون هذا محور لولبي يمكن اشتقاقه من اتحاد عمليتي انزلاق: $\frac{1}{2} + x, -y, z$ و $-\frac{x}{2} + y, \frac{1}{2} + z$ ليعطي $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z$. وبملاحظة إلى درجة اقل ما أن $l = 2n$ لـ $00l$. تكون الزمرة الفراغية $Pna2_1$.

(ب) تكافؤ بيانات hkl و khl تشير إلى أن زمرة لاوي هي $4/mmm$. تشير المحاور اللولبية والمناطق المركزية إلى $P4_12_12$ أو $P4_32_12$. سيصبح هناك تعاضم تماثل للصفوف $h00 = 0k0$ و $hh0$ بعامل اثنين و $00l$ بعامل أربعة.

(ج) هذا أمر محير مألوف: Cc أو $C2/c$ ؟ يكون هناك أربع جزئيات فقط في الخلية، التي ستقترح Cc ، لكن تنبه! بإمكان الجزئي أن يكون له إما تماثل 2 أو تماثل 1 بدرجة جيدة جداً وأن يكون له الزمرة الفراغية الأعلى في التماثل، التي ينبغي في كل حالة أن تجرب أولاً طبقاً إلى تدريب قياسي.

(د) على ما يبدو تكون هذه خلية ثلاثي الميل مضللة بالزاوية قريبة جداً إلى 90° . في الحقيقة يمكن أن تحول بواسطة المصفوفة $120/100/001$ إلى خلية أحادي الميل ممركرة C : $a' = 12.995$ ، $b' = 3.952$ ، $c' = 9.993 \text{ \AA}$ ، $\beta = 98.42^\circ$. يمكن أن يبين هذا تخطيطياً برسم المستوى xy من الخلية القديمة (التي تظهر على الأقل بأن α و γ هي الآن 90°). تحول للدالة بواسطة نفس المصفوفة، التي

تصنع الأدلة من الأزواج القوية (513) و (513)، (10, 2, 0)، و (440) (440).
تصبح بيانات 0kl هي 2k; 0, l في الخلية الجديدة، وحقيقة أن هذه تكون
غائبة عند $l = 2n + 1$ تظهر أن الزمرة الفراغية مرة ثانية هي Cc أو (أكثر
احتمالاً) C2/c.

الفصل الرابع

(٤, ١) (أ) $a^* = 1/a$ ، $b^* = 1/b$ ، $c^* = 1/c$ وتكون كل الزوايا هي 90°

(ب) $a^* = 1/(a \sin \beta)$ ، $b^* = 1/b$ ، $c^* = 1/(c \sin \beta)$ و $\beta^* = 180^\circ - \beta$ (لنظام

أحادي الميل $V = abc \sin \beta$)

(٤, ٢) $\lambda = 2d \sin \theta$ ، ضع $\sin \theta = 1$ ، لذا $\lambda = 2d$ و من ثم $d = \lambda/2$ و $d = 0.355 \text{ \AA}$ بالنسبة

لـ Mo K α ؛ و $d = 0.771 \text{ \AA}$ لـ Cu K α .

(٤, ٣) $\lambda = 2 \times 0.84 \sin \theta$ ، $\lambda = 2 \times 0.84 \sin \theta$ لـ Mo K α ، لذا $\theta = 25.0^\circ$ و $\sin \theta$

لـ Cu K α ، $\theta = 66.6^\circ$ ، لذا $\lambda = 1.54184/1.68$.

(٤, ٤) (أ) $\psi = 0$ ، $\phi_0 = \tan^{-1}(-x/y)$

حيث $\chi_0 = \tan^{-1}(z/k(x^2 + y^2))$ $k^2 = 1/(x^2 + y^2)$

لذا $\chi_0 = \tan^{-1}(z/\sqrt{(x^2 + y^2)})$

$\theta_0 = \sin^{-1}(\lambda r/2) = \sin^{-1}(\lambda \sqrt{(x^2 + y^2 + z^2)}/2)$

$\omega_0 = \theta_0$

(ب) لـ $\psi = 90^\circ$ ، الحد الثاني من ϕ يكون له مقام صفر، بالتالي $90^\circ - \phi_0$ لـ χ

يكون أيضاً صفر بسبب الفرق 90° بين ϕ و ϕ_0 ، بالتالي فإن $90^\circ \pm \chi$

اعتماد على إشارة z

$\theta = \theta_0$ (لا يعتمد هذا على ψ)

ليس من السهل تبسيط ω !

(٤,٥) $a = 8, b = 4, c = 10 \text{ \AA}$ تكون البلورة مثبتة تماماً حول المحور c . ليست هذه فكرة جيدة بسبب تأثير الانعكاس المضاعف.

(٤,٦) 200: 14.36, 7.18, 0, 0

020: 28.96, 14.48, 0, -90

002: 11.48, 5.74, -90, 0

425: 51.32, 25.66, 35.26, -45.00

(٤,٧) 200: 11.48, 5.74, -90, -90، ينبغي أن تكون سهلة التقييم

425: 51.32, -29.08, 90, -135.00، يمكن أن يكون هذا مسدودة بالحلقة χ

وتكون 200 و 020 غالباً من الصعب الوصول إليها.

(٤,٨) تكون المعاملات 111

(٤,٩) $\lambda = 2d \sin \theta$ ، $d_{002} = c/2 = 5 \text{ \AA}$ ، $\lambda = 1 \text{ \AA}$ ، يعطي هذا $\theta = 5.739^\circ$ و θ غير

الصحيحة 5.714° التي تعطي في الحسابات المعكوسة $d_{002} = 5.022 \text{ \AA}$ ، لذا تكون c غير

الصحيحة $= 10.044 \text{ \AA}$ ؛ 0.44% خطأ.

الفصل الخامس

(٥,١) (أ) رغم أن الامتصاص يكون أقل مع إشعاع Mo، فإن الفرق في هذه الحالة

يكون صغيراً إلى حد ما حوالي (20%). ينبغي أن تستخدم إشعاع Cu لكي

تحصل على بيانات أقوى.

(ب) يكون الامتصاص أكثر من الضعف من حيث الخطورة مع Cu، يعود هذا

إلى محتوى كلور عالٍ؛ يكون للبروم تأثير امتصاص مماثل مع نوعين من

الإشعاع، لكن يمتص الكلور إشعاع Cu بقوة أكثر عن Mo. لهذا يكون

Mo أفضل بشكل واضح من وجهة النظر هذه.

(ج) يقع Ru خلف حافة الامتصاص Mo ومن ثم يتضاءل الامتصاص، ومن ثم يكون Mo مفضلاً بقوة، حيث أن تأثيرات الامتصاص تكون أقل خطورة عنه مع Cu.

(د) تتطلب هذه التجربة استخدام إشعاع Cu، حيث إن التشتت غير السوي من O و N لا يمكن التمييز بينها مع Mo.

(هـ) أيها يمكن استخدامه، حيث أن وجود ذرات البروم سوف يؤدي إلى تأثيرات غير سوية قوية مع كلا النوعين من الإشعاع. قد يكون إشعاع Cu مفضلاً لو أن البلورة تحدث حيود بشكل ضعيف.

(٥,٢) هذا السؤال يتطلب مناقشة وعلى سبيل المثال لماذا تكون البلورة رديئة الإحادة للإشعاع السيني؟ هل هي صغيرة جداً، في أي حالة يكون إشعاع النحاس ممكناً؟ لو أنها بلورة بالحجم العادي، يكون إشعاع النحاس أقل تطبيقاً. لو أن المصادر والكواشف التقليدية لا تكون ملائمة، فإن الأقطاب الموجبة الدوارة، إشعاع سنكروتروني، وكواشف مساحة يمكن اعتبارها. لا تنسى أن نمو بلورة أفضل يكون اختيار آخر.

(٥,٣) إن هذا مثال زائف للغاية وهذه العلاقات لا يمكن أن تحدث كلها مع نفس البلورة. لاحظ أنه يوجد انتشار جيد من زوايا في χ و ϕ ، بحيث أنها لا تكون مشكلة. إن الإشارات التحذيرية هي:

الانعكاسين 3 و 11 ضعيفة جداً وينبغي حذفها؛

الانعكاس 4 قوى جداً (يمكن حذفه بشكل مؤقت، لكن لا بد أن نضيفه في

النهاية)؛

الانعكاس 7 يكون حاد بشكل غير سوي (احتمال بسبب يتعلق بالجهاز أو

حيود مضاعف)؛

الانعكاسين 10 و 11 عريضين جداً (تشويش من نوع ما أو هل البلورة غير مناسبة؟)؛

الانعكاسين 12 و 15 لهما نفس زوايا الضبط؛ هل توجد أكثر من بلورة؟
(٥،٤) لو كرر هذا النموذج خلال كل الحزمة الكاملة من البيانات، تكون الإجابة لا. تنقسم الانعكاسات إلى حزمتين منفصلتين بشكل واضح من مكافئات أحادي الميل بشدات متجمعة حول 200 و 260.

(٥،٥) لا توجد إجابة رياضية منفردة لهذا السؤال. إن المركب و THF لهما 37 وخمس ذرات لا هيدروجينية تتطلب 666 \AA^3 و 90 \AA^3 على التوالي. قد تحتوي خلية وحدة التركيب على ثلاث جزيئات من المركب (1998 \AA^3) بدون THF، لكن لا يكون التوافق جيد و $Z = 3$ لا تكون مرجحة. لو أنه يمسك جزيئين من THF لكل خلية وحدة تركيب (1332 \AA^3)، التي ستترك 518 \AA^3 كافية لحوالي ستة جزيئات من THF لكل خلية وحدة تركيب. مثل تلك الخلية سوف تعاني من فقد سريع للمذيب إلا إذا تمت حمايته. على سبيل المثال يتداوله تحت المحلول الأم وجمع البيانات مع بلورة مطلية بغشاء من زيت محمد.

(٥،٦) لكل دليل h, k و l أجمع القيم المطلقة وأقسمها على طول خلية وحدة التركيب المقابلة. هل النسب تكون متماثلة على نطاق واسع، لنقل خلال العامل اثنين؟ إذا لم تكون كذلك، فإن اختيار الانعكاسات تكون غير مناسبة. باستخدام كل الانعكاسات تكون النسب تقريباً 2، 3 و 6 ومن ثم لن يكون الاختبار مقنعاً. سوف تلاحظ أن الانعكاس الرابع (1, 10, -3) من المتوقع أن يكون غائباً نظامياً في بلورة مركزية C- ومن ثم لا يكون مناسباً تحديداً. إعادة الحساب مع (1, 10, -3) المحذوفة يعطي نسب 2، 2 و 6 التي لا تكون بالمثل مقنعة. تحتاج قائمة الانعكاسات إلى إدخال أكثر لها أدلة h, k عالية.

(٥,٧) (أ) الانعكاس الأول يكون له قيمة 20 مرتفعة نوعاً ما ويمكن لهذا أن يكون متأثراً بإنشطار $\alpha_1 - \alpha_2$ (سواء يضع هذا مشكلة تعتمد على الجهاز المستخدم). يكون الانعكاس الثاني أكثر تحذيراً: إنه قوي، انعكاس عند زاوية منخفضة الذي قد يكتسب شدة حيث يزيد تشيع البلورة انتشاره الفيسفسيائي. إن هذا السلوك من غير المرجح أن يكون غير مطابقاً لحزمة بيانات ككل وتطبيق تصحيح انسياب اعتماداً على سلوك مثل ذلك الحيود من المرجح أنه يختزل جودة حزمة البيانات.

(ب) الانعكاسين الثاني والثالث يكونا متجاورين لبعضهما ليقدم اختيارين مستقلين على حركة البلورة (تكون الزاوية بين المتجهين لهما حوالي 30°). ينبغي اختيار الانعكاسات لتكون متعامدة على بعضها البعض بقدر الإمكان (ينبغي لمتجهاتها أن تكون قريبة إلى 90° بقدر الإمكان وبالتأكيد لا تقل عن 45°).

(ج) تكون الانعكاسات متعامدة بشكل مناسب لكن يكون الثالث ضعيفاً مقارنة بالأخرى وقد يظهر تغيرات نسبية كبيرة في الشدة، جاعلة منه غير مناسب إما لمراقبة سلوك البلورة أو لتطبيق تصحيحات انحراف أثناء اختزال البيانات. من المستحيل أن يكون محددًا إلا إذا علمنا مستوى تميزه (ينبغي للانعكاسات القياسية أن تكون نسب $(I/\sigma(I))$ بحد أدنى 50).

(٥,٨) اعتبر أن مسارات الحزم المفضلة سوف تلي واحسب $(I/I_0 = e^{-\mu x})$ في كل حالة. تكون أطول المسارات دنيا وقصوى كما هي مبينة في العمود الأول أسفله، وتكون قيم $e^{-\mu x}$ المقابلة في الأعمدة الثلاثة التالية. لبلورة مثبتة على محورها الأبري الرأسي (c)، من الممكن أن نعمل افتراض معقول بأن حزمة الشعاع السيني سوف تمر على طول هذا المحور ويكون طولي المسار الأدنى والأقصى هما 0.06 و 0.08 على التوالي.

أطوال المسار دنيا وقصوى (mm)	مدى (I/I_0) إلى		
	$\mu = 0.1 \text{ mm}^{-1}$	$\mu = 1.0 \text{ mm}^{-1}$	$\mu = 5.0 \text{ mm}^{-1}$
(a) 0.02, 0.40	0.998–0.961	0.980–0.670	0.904–0.135
(b) 0.20, 0.40	0.980–0.961	0.818–0.670	0.368–0.135
(c) 0.06, 0.08	0.994–0.992	0.942–0.923	0.741–0.670
(d) 0.06, 0.40	0.994–0.961	0.942–0.670	0.741–0.135

لاحظ أنه للبلورات ذات $\mu = 0.1 \text{ mm}^{-1}$ يكون الامتصاص غير مميزاً، وبغض النظر عن مورفولوجية البلورة، يكون مدى معاملات النفاذ ضيقاً جداً. مع قيم μ أعلى يكون من الواضح أن الامتصاص يكون مفرطاً بصفة خاصة للشريحة الرفيعة وأن ضبط بلورة أبرية مع محورها الأبري رأسياً (c) يكون أفضل من ضبطها أفقياً (d) في أن الأول يعطي مجال أضيق أكثر من معاملات النفاذ، خاصة مع قيم عالية من μ .

(٥، ٩) يشمل هذا الحساب بعض التقريبات والافتراضات، ولكن تكون المسألة هي تقدير مناسب للشكوك الداخلة وتقرير فيما لو أن هذه تكون مهمة. اعتبر أولاً الحالة (b) واحسب الشكوك النسبية في أبعاد الخلية الثلاثة (تكون هذه تقريباً هي نفسها عند حوالي 1 جزء في 2000). ثم استمر على الافتراض بأن الأخطاء تكون موحدة الخواص. تعطي القيمة 1 في 2000 إسهام إلى الشك في طول C-C و $1.520 \text{ \AA} / 2000$ يساوي 0.0008 \AA الذي سوف لا يكون مميزاً على أي حال فيما عدا التحديدات الأكثر دقة. يكون الحساب ذات قيمة لكل توجهات الرابطة C-C. تكون الخلية في (a) أسوأ بشكل واضح. أحسب الشكوك النسبية في a، b و c: تكون القيم 1 في 700، 1 في 650 و 1 في 350 على التوالي، ستكون أكثر ارتفاعاً ولا تكون موحدة الخواص. أحسب الإسهام للشك في الرابطة C-C الواقعة موازية لكل من الاتجاهات [100]، [010] و [001]. تكون الإجابات هي 0.002، 0.002 و 0.004 \AA على التوالي. هذه، وبخاصة الأخيرة سوف تضيف

بشكل مميز إلى الشك في تحديد تركيب نموذجي. ربما تكون القيم المحسوبة دون التقدير الصحيح، حيث أننا أهملنا أي إسهام من الزوايا غير المقيدة.
(٥، ١٠) (أ) 280(33) ؛ (ب) 2016(54)؛ (ج) 14(21)؛ (د) 52(16).

الفصل السابع

(٧، ١) د ع c تمثل $2\pi \cos$ و s تمثل $2\pi \sin$ للإيجاز. يحلل الحد (A) إلى $chx \cdot cky \cdot clz - chx \cdot sky \cdot slz - shx \cdot cky \cdot slz - shx \cdot sky \cdot clz$ وممن ثم أيضاً إلى $shx \cdot sky \cdot clz + chx \cdot cky \cdot slz - shx \cdot sky \cdot slz$ مرتين ليعطي $shx \cdot cky \cdot clz + chx \cdot sky \cdot clz$ حتى أن $cx = c(-x)$ و $sx = -s(-x)$ فإن مركز الانقلاب سوف يلاشي كل القيم بأعداد فردية من حدود sine، بحيث أن $B = 0$. سوف تتضاءل الأجزاء المتبقية من A التي لها حدي \sin أيضاً، على سبيل المثال x, y, z سوف يلاشي $x, -z$ في أي حد يحتوي على slz . يختزل التعبير التام إلى $B = 0$ و $A = 8chx \cdot cky \cdot clz$.

(٧، ٢) حيث إن حافة الخلية في الإسقاط تكون 2.72 \AA ، فإن طول القطر الجسمي سيكون 4.71 \AA (مضروباً بواسطة $\sqrt{3}$). تكون القمم المقابلة لذرات S هي 0.22 و 0.78 ، من ثم فإن ذرتي S الواقعتين على نفس المحور ثنائي النقلة لا بد أن تكون 0.44×4.71 أو 2.07 \AA على حدة أي 2.07 \AA أو 2.67 \AA . تكون الأولى هي الأكثر افتراضاً. يمكن للمسافة Fe...S أن تحسب بافتراض أن المسافة من Fe إلى نقطة المنتصف من رابطة S-S سوف تكون 2.72 \AA (نصف حافة الخلية)، على طول اتجاه x ، على سبيل المثال. هكذا بالرجوع إليه، سوف تكون إحداثيات S الأقرب هي $0.11 - 0.50, 0.11, 0.11$ بالمرجعية إلى خلية وحدة التركيب الصحيحة بحافة 5.43 \AA ، من ثم تكون المسافة 2.28 \AA .

(٧، ٣) يمكن معالجة هذه المسألة على نحو أفضل بمجموعة من أشخاص معاً، بحيث يمكن تقسيم الحسابات! يعطي باترسون قمة عند $z = 0.197$ (مجموع = 88 عند 0.19

و 97 عند 0.20). هكذا يمكن لإشارات فورير أن تؤخذ من موضع Br عند $z = 0.10$ ، جاعلاً كل الإشارات هنا موجبة. عندما يتم إجراء هذا المجموع، يكون هناك نموذج ملموس من قمم منتظمة مظهرة الذيل الخاص بزمرات CH_2 ، التي تتداخل في أزواج في الإسقاط، من ثم يكون هناك نصف العدد من القمم بقدر عدد الذرات في السلسلة.

الفصل الثامن

(٨، ١) من عدد 16 متجه ذري للذرات الأربع، يتطابق أربعة منهم مع نقطة الأصل، اثنان عند كل من $2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z$ و $-2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2z$ (مستوى هاركر)؛ اثنان عند كل من $0, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2}$ و $0, \frac{1}{2} - 2y, \frac{1}{2}$ (خط هاركر)؛ وتشغل الأربع الأخيرة المواضع العامة $2x, 2y, 2z$ ؛ $2x, -2y, 2z$ ؛ $-2x, 2y, -2z$ ؛ $-2x, -2y, -2z$ في زمرة باترسون الفراغية $P2/m$.

(٨، ٢) يكون هناك 32 موضعاً متساوياً كافياً لذرة Ru منفردة، اعتماداً على إلى أي مدى يمكن لمواضع القمة المرصودة أن تقارن مع القائمة الكاملة من التمرين (٨، ١)، شاملة متكافئات تماثل وعلى الالتباس العام حيث يمكن إضافة أو طرح $\frac{1}{2}$ من أي محور. يكون الحل الأكثر وضوحاً هو 0.224، 0.222، 0.081. لو أن الجزيء سيكون متبلمر ثنائي فلابد لذرة Ru هذه أن تكون قنطرية بواسطة ذرتي Cl لذرة Ru أخرى مرتبطة بها بواسطة مركز انقلاب (لو أنها تكون قنطرية بطريقة ما إلى أخرى مرتبطة بها بواسطة محور لولبي أو مستوى انزلاق، ستكون النتيجة هي بوليمر لا نهائي). إن أقرب ذرة ذات علاقة تماثلية مناسبة لهذه الذرة هي تلك عند 0.224، -، 0.222، -، 0.081 - وسوف تكون حوالي $15 \text{ \AA} \times \sqrt{(0.45^2 + 0.44^2 + 0.16^2)}$ أو حوالي 9.5 \AA بعيداً. يكون هذا بعيداً جداً، حيث أن القنطرة Ru-Cl-Ru لن تكون أكثر من 3.5 \AA .

(٨، ٣) الطريقة الأبسط هي احتمالية وضع Ni وذرات "S" القنطرية على أركان المربع،

وهكذا:

Ni1 عند 1.2, 1.2, 0 S1 عند 1.2, -1.2, 0

Ni2 عند -1.2, -1.2, 0 S2 عند -1.2, 1.2, 0

يمكن وضع ذرات S الأخرى عند:

1.2, 1.2, -1.2	1.2, 1.2, 1.2
-1.2, -1.2, -1.2	-1.2, -1.2, 1.2
1.2, 2.4, 0	2.4, 1.2, 0
-1.2, -2.4, 0	-2.4, -1.2, 0

(٨, ٤) تظهر الغيابات النظامية خلية وحدة تركيب ممرکز-C ومستوى انزلاق

$c \perp b$ في كل حالة (عامل التماثل الثالث). $Cmc2_1$ سوف يكون له مستوى

هاركر Harker plane عمودي على $c(2x, 2y, \frac{1}{2})$ وخط هاركر موازي إلى

$a(0, 2y, 2z)$ سوف يكون له مستوى هاركر متعامد على $a(0, 2y, 2z)$

وخط هاركر موازياً لـ $c(0, 0, 1/2 + 2z)$.

الفصل التاسع

(٩, ١) تكون المحددة المطلوبة هي:

$$\begin{vmatrix} E(0) & E(h) & E(2h) \\ E(-h) & E(0) & E(h) \\ E(-2h) & E(-h) & E(0) \end{vmatrix}$$

التي يمكن أن تمدد لتعطي علاقة غير متساوية

$$E(0)[E^2(0) - |E(2h)|^2 - 2|E(h)|^2] + 2|E(h)|^2E(2h) \geq 0$$

يمكن أن يبسط هذا بإلغاء العامل المشترك $[E(0) - E(2h)]$ وإعادة الترتيب ليعطي

$$|E(h)|^2 \leq \frac{1}{2} E(0)[E(0) + E(2h)]$$

مع السعات المعطاة، يكون الطرف الأيسر من المتباينة هو 4 والطرف الأيمن هو $\frac{15}{2}$ أو $\frac{3}{2}$ لقيم $E(2h)$ الموجبة والسالبة على التوالي. إن إشارة $E(2h)$ لا بد أن تكون موجبة.

(٩،٢) تأتي المعادلة (٩،٨) مباشرة من تمدد المحددة في (٩،٧). مع السعات المعطاة، تصبح المتباينة $8 \geq 0$ أو $-8 \geq 0$ اعتماداً على إشارة $E(k)E(h-k)E(-h)$. لا بد لإشارة $E(-h)E(h-k)E(k)$ أن تكون لهذا موجبة.

(٩،٣) تكون محددة الرتبة الرابعة

$$\begin{vmatrix} E(0) & E(h) & E(h+k) & E(h+k+1) \\ E(-h) & E(0) & E(k) & E(k+1) \\ E(-h-k) & E(-h) & E(0) & E(1) \\ E(-h-k-1) & E(-k-1) & E(-1) & E(0) \end{vmatrix}$$

مع $E(h+k) = E(k+1) = 0$ ، يكون هذا علاقة المتباينة

$$E^2(0)[E^2(0) - |E(h)|^2 - |E(k)|^2 - |E(1)|^2 - |E(-h-k-1)|^2] + |E(h)E(1)|^2 + |E(k)E(h+k+1)|^2 - 2E(h)E(k)E(1)E(-h-k-1) \geq 0$$

ومع ساعات كبيرة مناسبة يمكن أن يستخدم هذا لإثبات أن إشارة

$E(h)E(k)E(1)E(-h-k-1)$ لا بد أن تكون سالبة؛ هذه هي علاقة الرباعية السالبة.

(٩،٤) يتم الحصول على المحددات الثلاث من المحددة في التمرين (٩،٣) بالتبديل

الدوري للأدلة. تعطي أيضاً دليل أقوى على الرباعية السالبة بشرط أن

$$E(k+1) = E(h+1) = 0$$

(٩،٥) لكي نبدأ، يتم تصنيف إشارات (+) إلى 5.7 و 14.5 والرمز A إلى 8.8. تعني B

الإشارة المعاكسة لـ A. حل بديل يمكن الحصول عليه بالبدء مع اتحادات أخرى من

الإشارات. حقيقة أن $A = +1$ يكون مبيناً بالقيم البديلة الموجودة إلى 8.13، هنا B و -.

						إشارات محددة
						1 10 B
						1 14 BBB
5	7+	-5	7+	5	7+	2 17 A
5	-7+	14	5+	10	0+	-9 12* -
10	0+	9	12+	15	7+	2 19 -
5	17-	-5	7+	14	-5*-	3 10 BB
5	-17-	8	8 A	-8	8 A	6 -3* A
10	0+	3	15 A	6	3 B	3 15 A
-5	7+	9	-12*-	5	17-	5 7+
6	3 B	-3	15 A	6	-3* A	6 -3* A
1	10 B	6	3 B	11	14 B	5 17 -
11	14 B	-1	14* A	-1	10* A	5 19 B
-10	0+	10	0+	8	-8 A	-7 -2+
1	14 B	9	14 A	7	2+	6 3 BB
5	7+	-5	17-	11	-4* B	7 2++
7	3+	7	2+	1	14 B	-9 14* B
12	10+	2	19-	12	10+	5 19 B
5	19 B	11	-4* B	-3	15 A	9 9 A
5	-19 B	1	10 B	12	-6+	-8 8 A
10	0+	12	6+	9	9 A	1 17+
6	3 B	6	3 B	-5	7+	9 -12*-
6	3 B	7	3+	13	6 B	1 17+
12	6+	13	6 B	8	13 B	10 5-
-3	15 A	-5	7+	5	-7+	-7 10* B
10	-5*+	7	10 A	-2	17* B	10 0+
7	10 A	2	17 A	3	10 B	3 10 B
						9 12 +
						9 14 A

10	5 -	9	-9 A	5	19 B	-5	19 B	10	0 +++
-9	9 A	-2	19*+	2	-17*B	13	-6*A		
1	14 B	7	10 A	7	2 +	8	13 -	10	5 -
-2	17*B	-1	-10 B					11	4 A
9	-14*B	8	13 B					11	14 B
7	3 +	7	3 +					12	6 ++

لو نظرت إلى الحل لكي تقرر ما الذي تفعله، جرب مرة ثانية مع مجموعة بدء أخرى، لنقل $5, 7 = +$ و $14, 5 = -$. ينبغي لك أن تظل تحصل على حزمة متوافقة، والرمز A ينبغي أن يظل معطى بإشارة +.

12 10 ++

13 6 B

14 5 +

15 7 +

الفصل الحادي عشر

(١١، ١) الخطأ المتوقع في α يكون نصف القيمة من الأخريات، بالتالي يكون الثقل ضعف القيمة من الأخريات، بدلاً من $7.3 = \alpha$ ، يكون لدينا $2\alpha = 146$. يغير التطبيق القوى من التحفظ المعادلة $\alpha + \beta + \gamma = 180$ إلى $2\alpha + 2\beta + 2\gamma = 360$ (يكون العامل 2 اختياري).

تكون المعادلات الطبيعية هي $A^T Ax = A^T b$ أي أن:

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1012 \\ 46 \\ 55 \\ 360 \end{pmatrix}$$

الذي يعطي

$$\begin{pmatrix} 8 & 4 & 4 \\ 4 & 5 & 4 \\ 4 & 4 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1012 \\ 766 \\ 775 \end{pmatrix}$$

تأكد من الحل $\alpha = 73.6^\circ$ ، $\beta = 48.4^\circ$ ، $\gamma = 57.4^\circ$ بإظهار أن هذا يحقق المعادلات.
(١١،٢) تكون المعادلات المرصودة هي:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 7 \end{pmatrix}$$

تكون المعادلات الطبيعية:

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 5 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 7 \end{pmatrix}$$

التي تعطي

$$\begin{pmatrix} 35 & 9 \\ 9 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 46 \\ 12 \end{pmatrix}$$

ويكون الحل هو $m = \frac{5}{4}$ ، $c = \frac{1}{4}$ ، بحيث يكون خط الانكفاء $y = \frac{5}{4}x + \frac{1}{4}$.

(١١،٣) تكون مصفوفة المعادلات الطبيعية هي

$$\begin{pmatrix} 35 & 9 \\ 9 & 3 \end{pmatrix}$$

ومعكوسها هو:

$$\frac{1}{24} \begin{pmatrix} 3 & -9 \\ -9 & 35 \end{pmatrix}$$

ويعطي هذا قيم تتناسب إلى

$$\begin{pmatrix} \sigma_m^2 & \sigma_m \sigma_c \mu_{mc} \\ \sigma_m \sigma_c \mu_{mc} & \sigma_c^2 \end{pmatrix}$$

$$\cdot \mu_{mc} = -9/\sqrt{(3 \times 35)} = -0.86 \text{ إن بحيث}$$

(١١،٤) تكون المعادلات المرصودة المثقلة هي

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 146 \\ 46 \\ 110 \\ 180 \end{pmatrix}$$

تكون المعادلات الطبيعية هي:

$$\begin{pmatrix} 5 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 472 \\ 226 \\ 400 \end{pmatrix}$$

(١١،٥) كل المعادلات تكون خطية فيما عدا قاعدة (جتا) cosine. تكتب هذه مثل:

$$f(\alpha, \beta, \gamma, a, b, c) = b^2 + c^2 - a^2 + 2bc \cos \alpha = 0$$

من ثم تكون الاشتقاقات هي:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \alpha} &= -2bc \sin \alpha & \frac{\partial f}{\partial \beta} &= 0 & \frac{\partial f}{\partial \gamma} &= 0 \\ \frac{\partial f}{\partial \alpha} &= -2a & \frac{\partial f}{\partial \beta} &= 2b + 2c \cos \alpha & \frac{\partial f}{\partial \gamma} &= 2c + 2b \cos \alpha \end{aligned}$$

وتكون مصفوفة الاشتقاقات لهذا هي:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -2bc \sin \epsilon & 0 & 0 & -2\alpha & 2b+2c \cos \alpha & 2b+2c \cos \alpha \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

الفصل الثاني عشر

(١٢,١) (أ) يعادل هذا بيانات عند زاوية مرتفعة، التي تحتوي على إسهام قليل من ذرات H أو كثافة تشوه. من ثم يكون من المفيد للحصول على مواقع ذرية أن تعمل تقريب أفضل إلى المواضع النووية؛ من ثم سوف تظهر خرائط الفرق ذرات H و/أو توزيعات لا كروية بشكل أوضح.

(ب) يعادل هذا بيانات عند زاوية منخفضة، التي تعتمد أكثر على السمات العريضة من التركيب. قد تساعد في المراحل الأولى من تطوير تركيب. الطريقة الأكثر تأثير هي أن تطبق القطع عند θ_{\max} .

(١٢,٢) (أ) 12 ذرة \times (3 إحدائيات + 1 U_{iso}) = 12 \times 4 = 48؛ بالإضافة إلى عامل قياس يعطي 49.

$$(ب) 12 \times (3+6) + 1 = 109$$

$$(ج) 12 \times 9 + 12 \times 4 (\text{H atoms}) + 1 = 157$$

(١٢,٣) (أ) تكون y حرة ولكن x و z تكونان مثبتتان عند قيم مناسبة. $U^{13} = U^{23} = 0$ ، تكون قيم $U^{\text{ال}}$ أخرى حرة.

(ب) تكون z حرة، لكن تكونا x و y مرتبطتان خطياً (مثل $x = y$ لكن يعتمد

التقييد التام على الوضع الدقيق لمستوى المرآة). للموضع x, y, z ، $U^{11} = U^{22}$ و $U^{13} = U^{23}$.

(١٢،٤) (أ) لا شيء؛ (ب) كلها؛ (ج) a و c ؛ (د) b

(١٢،٥) جزيء من THF لا يكون مستوياً.

(١٢،٦) (أ) كل $C-F$ متساوية، كل $F-F$ متساوية (أي أن كل زوايا $F-C-F$

متساوية)، تحفظات U^{ij} رابطة جاسئة $rigid-bond$ لكل روابط $C-F$.

(ب) كل روابط $C-C$ متساوية، كل زوايا $C-C-C$ متساوية (مكافئة لعمل

كل مسافات 1,3- متساوية)، كل مسافات 1,4- متساوية (تمييز عن شكل

القارب، حيث أن هذا لا يكون صحيحاً)، رابطة جاسئة $U^{ij} - rigid - bond$

لزوايا $C-C$. ينبغي لتحفظات نموذج راكب أن تكون مستخدمة أيضاً

لذرات H .

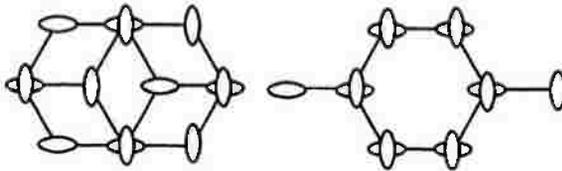
(١٢،٧) تنقيح بارامترين متكافئين بالتماثل حيث إنه في حال أن يكونا مستقلين يعطيا

مصفوفة أحادية، التي لا يمكن أن تقلب (يكون المحدد صفر)، يعني التماثل - الكاذب أن

محدد المصفوفة يكون صغيراً (تكون المصفوفة في حالة معتلة)، من ثم فإن الانقلاب ينتج

إزاحات بارامتر كبيرة وشكوك كبيرة.

(١٢،٨) أمثلة موضحة في الشكل رقم (١٣،١):



الشكل رقم (١٣،١). أنماط محتملة من خلل تولوين عبر مركز انقلاب. في كل حالة، يشاهد موضعين

متداخلين مع أهليلجات مستطالة أفقياً ورأسياً لمكون الذرات.

(١٢،٩) تكون عناصر تماثل الزمرة الفراغية في حد ذاتها كبيرال. من الضروري أن تغيير الزمرة الفراغية $P4_3$ ، التي يكون لها عوامل من كيرالية معاكسة.

(١٢،١٠) تصبح بارامترات الإزاحة أو بارامترات الإزاحة كبيرة جداً في محاولة لإخفاء الكثافة الإلكترونية غير المطلوبة. تكون قيم R أيضاً أكبر من القيمة بدون الذرة.

(١٢،١١) (أ) تقل أدلة R عادة (أكثر من ذلك لو أنها غير مثقلة)، لكن من المحتمل أن s.u.s تزيد.

(ب) تقل أدلة R ، تقل s.u.s، بسبب التلاؤم الأفضل.

(ج) تزيد أدلة R ، كذلك تفعل s.u.s.

(د) تقل أدلة R ، ربما ليس كثيراً، يكون هناك تأثير صغير على s.u.s.

(هـ) تقل أدلة R ، كذلك تفعل s.u.s.

الفصل الثالث عشر

$$\bar{x} = 1.532, \sigma = 0.004, \sigma(\bar{x}) = 0.001 \text{ \AA} \quad (13, 1)$$

$$\sigma^2(x_1 + x_2) = \sigma^2(x_1) + \sigma^2(x_2) \quad (13, 2)$$

$$\sigma^2(x_1 - x_2) = \sigma^2(x_1) + \sigma^2(x_2)$$

$$\sigma^2(x_1 + x_2 + x_3) = \sigma^2(x_1) + \sigma^2(x_2) + \sigma^2(x_3)$$

$$\sigma^2(x_1 x_2) = x_2^2 \sigma^2(x_1) + x_1^2 \sigma^2(x_2)$$

(١٣،٣) يكون مجموع الزوايا 180° بالضبط؛ يكون الشك صفر- مثال من ارتباط

كلي!

الفصل الرابع عشر

(١٤،١) (أ) لا (ب) نعم، احتمال كبير جداً (ج) من المحتمل لا.

(٢، ١٤) $\chi^2 = 42.65$ ، التي تكون كبيرة جداً لحزمة من قيم مأخوذة من تعداد وحييد،
بالتالي لا تكون كل أطوال الروابط متكافئة (بافتراض أن s.u.s صحيحة!).

(٣، ١٤) (أ) مستوي، 2؛ (ب) غير مستوي؛ 2 (ج) مستوي؛ 2 (د) غير مستوي؛ 2
(هـ) مستوي، 4.

(٤، ١٤) ثلاث روابط (كل واحدة تساوي الرابطة المضادة)، وثلاث زوايا (كل الزوايا
12 الأخرى إما أن تكون مثل هذه، ($180^\circ -$ هذه)، أو تكون 180° تماماً.

(٥، ١٤) ستة روابط، بتحديد أكثر يكون هناك تسع زوايا مستقلة (بسبب أنه يوجد 15
 $6(7 \times 3) =$ عدد درجات طلاقة داخلية لعدد 7 ذرات)، لكن كل الـ 15 ينبغي أن يكون
مستشهداً بها طبيعياً!

الفصل الخامس عشر

(١، ١٥) (أ) تهمز C(1) أقل إلى حد ما عن مجاورتها و N(3) أكثر بعض الشيء، من
المحتمل أن هاتين الذرتين قد تم تصنيفيهما خطأ (ومن ثم عاملي التشتت)
وينبغي أن يكونا N(1) و C(3) على التوالي. إن فحص قيم U قد تظهر الفرق
بشكل أكثر وضوحاً وينبغي للهندسة الجزيئية حول كل ذرة أن يتم فحصها.
قد يظهر رسم فرق الكثافة الإلكترونية في مستوى الحلقة كثافة إلكترونية غير
منمذجة. كلا النموذجين ينبغي أن ينقحا لاكتشاف أيهما يكون أكثر
وضوحاً. لو أن أي منها يكون غير مقنع، قد يوجد خلل، شاملاً دوران 180°
حول محور يمر خلال C(6)، C(2) ومنتصف الرابطة C(4)-C(5). قد تتطلب
نمذجة الخلل تطبيق تحفظات إلى هندسة الحلقة؛ أحد الاحتمالات هو تحفظات
متشابهة بحيث يكون لمكونات الحلقتين نفس الهندسة الداخلية.

(ب) يبدو أن $C(9)$ تكون متأثرة بالخلل، الذي سيعالج (خيار الإغفال) كخلل ديناميكي حول موضع ذرة وحيدة. ربما لا يكون هذا هو الوصف الأفضل للخلل وأن نموذج ساكن شاملاً موقعين اختياريين أو أكثر للذرة قد يكون ملائماً. لكي تقيم النموذج الساكن يكون من الضروري أولاً بواسطة قيم U له أن نشطر $C(9)$ لكي تعطي موضعين بديلين [$C(9A)$ و $C(9B)$]. تكون التحفظات مفيدة هنا، خاصة الهندسية منها، التي أما أن تثبت كلتا المسافتين $O - C$ الطرفين إلى طول قياسي أو التحفظ على $O(9) - C(9A)$ و $O(9) - C(9B)$ لكي تكونا متساويتين. قد يكون من المحتمل فقط أن تنجح بارامترات الإزاحة الأنيزوتروبية، بشرط تطبيق تحفظات رابطة جاسئة rigid-bond إلى هذه. ليس صحيحاً عامة أن تفترض أن مواقع $C(9A)$ و $C(9B)$ تكون مشغولة بالتساوي وأن بارامتر إشغال لا بد أن يكون منقحاً: مع مكونين خلل نكون في حاجة فقط إلى بارامتر واحد، حيث أن إشغالات الموقعين لا بد أن تجمع إلى الوحدة. عندما يتم فحص كل من الخلل الديناميكي والساكن بالكامل يمكن في العادة أن نحدد أيهما يكون السائد.

(ج) توجد عدة احتمالات هنا لو أن الجزيء يقع في بلورة تكون أبرية والتي تحتوي على عنصر ثقيل أو أكثر، فإن استطالة الأهلجيات في نفس الاتجاه يمكن أن يحدث كنتيجة لتصحيح امتصاص غير ملائم (لو أن هذا صحيحاً، فإن معظم الأهلجيات في التركيب تبدو بنفس الشكل). احتمال آخر هو أن الجزيء يكون غير منتظماً أو مشوهاً خلال شبكية ويكون هذا ممثلاً حالياً بخلل واحد فقط. من الممكن أيضاً أن تكون الزمرة الفراغية خطأً و كنتيجة لتعرض الجزيء لتمائل غير صحيح. في الحقيقة تبدو الأهلجيات

شبيهة بالقرص (مفلطحة) بدلاً من كونها مستطالة (متطاولة)، التمييز الذي يكون من الصعب عمله من المشهد المعطى ويعود هذا إلى تحول طور صلب - صلب أولي في HCN.

(د) قد يحتوي العنوان على ما يلي (أ) أن نظام ترقيم الذرة يكون مبنياً (ب) مستوى الاحتمالية المستخدمة (ج) تكون ذرات H مرسومة على هيئة كرات صغيرة مع أنصاف أقطار مطلقة (د) يظهر الشكل جزء من شبكية الهيدروجين الداخل في روابط. يمكن أن تضيف ترميمات تشير إلى الذرات المرتبطة بالتمائل التي تكون تلامسات مع ماء الإسناد والجزئيات العضوية (مثل O9) وإلى الهيدروجينات الداخلة. يكون من الضروري حينئذ أن نعرف عمليات التماثل المستخدمة لتوليد O9 من O9، ... الخ.

(هـ) ضع الروابط التي تحتوي Cd1 أولاً، متبوعة بروابط Cd2، Cd3 و Cd4. استخدم نفس الترتيب للذرات المرتبطة لكل ذرة Cd (مثل O/S/S/Cl - Cd، مع ذرة S أولاً بترقيم أقل. ينبغي للروابط مثل Cd4 - Cd1 أن تتقلب إلى Cd1 - Cd4. يمكن لروابط Cd - Cd إما أن تتجمع عند البداية أو عند النهاية؛ حيث تكون طويلة، أنا أقترح عند النهاية. يكون مطلوباً عنوان جدول ربما يعرف المركب الداخل والواصلات (بافتراض A) مستخدمة، تكون مطلوبة. نظم العمود أقصى اليمين بطريقة صحيحة.

(و) معظم التغييرات سوف تشمل إعادة هيكلة، وضع بعض الرموز بحروف مائلة، رمز سفلي أو علوي، وضع أكثر أناقة، حروف غير ASCII، إزالة نص زائد، ووضع مفتاح كلمات مع CIF مع نص مفصل. من ناحية ثانية، ليس موضعاً هنا خط الفصل يمكن زيادته (من 1 إلى 1.5).

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1 at 150(2) K.

Empirical formula	C24 H33 N3
Formula weight	363.53
Crystal description	colourless tablet
Crystal size	0.54 × 0.50 × 0.27 mm
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2(1)/c
Unit cell dimensions	a = 12.736(6) Å alpha = 90 deg. b = 15.371(6) Å beta = 94.12(8) deg. c = 10.676(5) Å gamma = 90 deg.
Volume	2084.6(16) Å ³
Reflections for cell refinement	58
Range in theta	12.5 to 17.5 deg.
Z	4
Density (calculated)	1.158 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.068 mm ⁻¹
F(000)	792
Diffractometer type	CAD4
Wavelength	0.71073 Å
Scan type	omega/theta
Reflections collected	3680
Theta range for data collection	2.65 to 25.03 deg.
Index ranges	-14 ≤ h ≤ 15, 0 ≤ k ≤ 18, 0 ≤ l ≤ 12
Independent reflections	3680 [R(int) = 0.000]
Observed reflections	2412 [I > 2sigma(I)]
Decay correction variation	+/- 7%%
Structure solution by	direct methods
Hydrogen atom location	calc
Hydrogen atom treatment	constr
Data/restraints/parameters	3680/0/253 (least-squares on F ²)
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0585, wR2 = 0.1304
Final R indices (all data)	R1 = 0.0975, wR2 = 0.1578
Goodness of fit on F ²	1.039
Final maximum delta/sigma	0.000
Weighting scheme	calc w = 1/[s ² (Fo ²) + (0.6200P) ² + 0.0P] where P = (Fo ² + 2 Fc ²)/3
Largest diff. peak and hole	0.21 and -0.21 e.Å ⁻³

الفصل السادس عشر

(١٦,١) مبین CIF الأصلي بأسفل، مع تعليقات.

ليست هذه بداية جيدة، ربما يكون CIF أعد في منسق نصوص (word processor) وتم نقله بطريقة سيئة، انظر أسفله.

```

ü@üü@üü@üü@üü@üü@üü@üü@# =====
      INITIAL PUBLICATION REQUEST
# =====
_publ_contact_author
'Prof. John Smith'
;
Faculty of Pharmaceutical Sciences | No. of data items > no. of data names.
John Smith University             | Address will be lost.
John Smithsville
IN 40678
U.S.A.
;
↓ Space not allowed.
_publ_contact_author_email       | J. Smith@xray.jsu.edu
_publ_contact_author_fax         | '(1) 727 564 2209'
_publ_contact_author_phone       | '(1) 727 564 2925'
_publ_contact_letter
;
_publ_requested_coeditor_name    | ?
_publ_requested_journal          | 'Acta Crystallographica, Secti
↑ Line may have been >80 characters. Information
has been lost and the text string has not been
terminated.

_publ_author_name
_publ_author_address
'John Smith'                      # lastname, firstname ← minor syntax error
;
Faculty of Pharmaceutical Sciences
John Smith University
John Smithsville
IN 40678
U.S.A.
;

```


← space should be underscore

```

_chemical_formula_weight      ' 444.44' ← quotes are not necessary
_symmetry_cell_setting        'triclinic' ← quotes are not necessary

_symmetry_space_group_name_H-M 'P1^-^' ← not standard symbol.
_cell_length_a                 5.267(2)
_cell_length_b                 7.440(13)
_cell_length_c                 9.872(2)
_cell_angle_alpha              86.15(2)
_cell_angle_beta               72.33(2)
_cell_angle_gamma              86.89(2)
_cell_volume                   354.3 (4)
                                ↑
                                illegal space

_cell_formula_units_z          1
_exptl_crystal_density_diffn   '2.243' ← quotes are not necessary

_exptl_crystal_density_meas   ?
_exptl_crystal_density_meas   'none' ← quotes are not necessary
....

```

→ data item appears twice in same block.

computing_data_reduction

```

'TEXSAN. TEXRAY Structure Analysis Package (Molecular Structure Corporation,
1985)'

```

← This type of text string cannot extend beyond one line.

← typographical error

```

_publ_section_references
:
Beurskens, P. T. (1984). Technical Report 1984, Crystallography lab. Toernooiveld,
6525 Ed Nijmegen, Netherlands.
....
Sheldrick, G. M. (1986). SHELXS86. Program for the solution of crystal structures,
University of G\ottingen.
  ← closing semi-colon (;) is missing.
  No. of data items ≠ No. of data names: content of all four
  captions will be lost.

```

```

_publ_section_figure_captions
'Fig. 1'
: ORTEPII (Johnson, 1976) drawing of the title compound with the atomic
numbering scheme, viewed along the a axis.
Ellipsoids for non-H atoms correspond to 50% probability.
;
'Fig. 2'
: Packing diagram of the title compound along the a axis of the unit cell;
intermolecular hydrogen bonds are represented by dashed lines.

```

```

      typing error—data name will not be recognised and Table headings
      will be lost.
      ↓
      .publ_sectionm_table_legends
      'Table I'
      ; Fractional atomic coordinates and equivalent isotropic thermal parameters
      (\%A^2^).
      ;
      'Table II'

      ; Selected bond length (\%A) and angles (^o^).
      ....
      loop_
      .geom_bond_atom_site_label_1
      .geom_bond_atom_site_label_2
      .geom_bond_distance
      .geom_bond_site_symmetry_1
      .geom_bond_site_symmetry_2
      .geom_bond_publ_flag
      Cu(1) O(1) 2.446(8) . . . yes
      Cu(1) O(6) 2.468(5) . . . yes
      Cu(1) N(5) 1.985(4) . . . yes
      O(1) C(2) 1.241(7) □ □ yes □ represent alternative positions of one
      missing place holder (or one symmetry
      operator)
      C(1) C(2) 1.394(9) . . . yes
      ....

      This should be a comment (preceded by a #) or omitted.
      ↓
      ; Anisotropic displacement parameters.
      loop_ .atom_site_label
      .atom_site_U~11~
      .atom_site_U~22~
      .atom_site_U~33~
      .atom_site_U~12~
      .atom_site_U~13~
      .atom_site_U~23~
      } Tilde symbols are not part
      of these data names—they
      will not be recognised
      Cu(1) 0.023(4) 0.021(4) 0.017 (5) -0.007(3) 0.008(4) -0.016(5)
      ↑
      illegal space.

      .....
      .....
  
```


ثبتت المصطلحات

أولاً: عربي - إنجليزي

١

intensity statistic

إحصائيات شدة

random errors,

أخطاء عشوائية

systemic errors,

أخطاء منهجية

extinction

إخماد

R- indices,

أدلة - R

Miller indices

أدلة ميلر

indices

أدلة، معاملات

correlation

ارتباط

absorption correlation

ارتباط امتصاص

shift- limiting

تحديد - إزاحة

atomic displacement

إزاحة ذرية

Friedel pairs	أزواج فريدل
polarization of light	استقطاب الضوء
synchrotron radiation	إشعاع سنكروترون
recrystallization	إعادة البلورة
convolution	التفاف
stereoscopy	الرؤية المجسمة
wavelength	الطول الموجي
absorption	امتصاص
capillary tubes	أنابيب شعرية
vapour diffusion,	انتشار بخار
liquid diffusion	انتشار سائل
anomalous dispersion,	انتشار غير سوي (غريب)
mosaic spread	انتشار فسيفسائي
reactant diffusion,	انتشار متفاعل
standard deviation,	المخرف معياري (قياسي)
Renninger reflection	انعكاس ريننجر
reflections	انعكاسات
anisotropic	متباين الخواص (لا متناحي)
restraints	التحفظات



parameter	بارامتر
displacement parameters	بارامترات إزاحة
Patterson search	بحث باترسون
optical	بصري
single crystal	بلورة وحيدة



variance	تباين
gel crystallization	تبلور جلّ، هلامة
determination	تحديد
resolution	تحليل (تفريق)
analysis of variance	تحليل التباين
molecular graphics,	تخطيط بياني جزيئي
hydrogen bonding	ترابط هيدروجيني
sublimation	تسامي
scattering	تشتت
Thomson scattering	تشتت طومسون
configuration	تشكيل، تشكّل
Patterson synthesis,	تشبيد باترسون

Fourier synthesis	تشبيد فوريير
Lorentz- polarization corrections	تصحیحات استقطاب-لورنتز
damping	تضاؤل، إخماد
crystal packing	تعبئة البلورة
intermolecular interaction	تداخل بين جزيئي
pseudo- symmetry	تماثل - كاذب
metric symmetry,	تماثل (تناظر) مقاسي
translation symmetry	تماثل انتقال
centring	تمركز
lattice centring	تمركز شبكية
bisecting	تنصيف
refinement	تنقيح
structure refinement	تنقيح التركيب
least- squares refinement	تنقيح بالمربعات الصغرى
twinning	توأمة
statistical distribution	توزيع إحصائي
Poisson distribution	توزيع بويسون
Gaussian distribution	توزيع جاوسيان
normal distribution	توزيع طبيعي

ج

international tables for crystallography

جداول دولية للكريستالوجرافيا

molecular

جزيئي

rigid body

جسم صلب - جاسئ

Soxhlet apparatus

جهاز سوكسلت

goodness of fit

جودة التلائم أو التوفيق

ح

absorption edge

حافة امتصاص

air- sensitive

حساسة للجو

structure solution

حل تركيب

powder diffraction

حيود بالمسحوق

خ

Patterson map

خريطة باترسون

Harker lines

خطوط هاركر

disorder

خلل، عدم انتظام

unit cell

خلية وحدة تركيب

precision and accuracy

د

دقة وإتقان

goniometer head

ر

رأس مقياس زوايا

negative quartets,

رباعيات سالبة

Wilson plot

رسم ويلسون

torsion angle

ز

زاوية التواء (فتل)

azimuthal angle

زاوية السمت

dihedral angle,

زاوية زوجية

group

زمرة

space group

زمرة فراغية

Laue group

زمرة لاوي

point group

زمرة نقطية

amplitude

س

سعة

ش

lattice	شبكة
Bravais lattice	شبكة برافيس
reciprocal lattice	شبكة معكوسة
X-ray	شعاع سيني
uncertainty	شك
uncertainty standard	شك قياسي

ص

X-ray photographs	صور فوتوغرافية للشعاع السيني
tangent formula	صيغة مماس

ض

crystal mounting	ضبط البلورة
Lagrange's multipliers	ضوارب لاجرانج

ط

direct methods	طرق مباشرة
phase	طور

م

site occupancy factor	عامل إشغال موقع
occupancy factor	عامل الإشغال
structure factor	عامل تركيب
scattering factor	عامل تشتت
precipitant	عامل مرسب (مذيب - ضد)
inequality relation ships	علاقات متباينة
R-factors	عوامل R-

ن

systematic absences	غيابات منهجية
---------------------	---------------

ف

difference electron density	فرق كثافة إلكترونية
-----------------------------	---------------------

ق

database	قاعدة بيانات
Bragg's law	قانون براغ
Friedel law	قانون فريدل
polarity	قطبية
block- diagonal	قطري - قالي

standard	قياسي
constraints	قيود



area detector	كاشف مساحة
density of crystals	كثافة البلورة
electron density	كثافة إلكترونية
chiral	كيرالي
chirality	كيرالية



residuals	متخلفات (راسبيات)
equivalent	متكافئة
mean	متوسط
displacement ellipsoid	مجسم إزاحة أهليلجي
ellipsoid	مجسم قطع ناقص (أهليلجي)
microscope	مجهر
contents	محتويات
Karle – Hauptman determinants	محددات - كارلي - هوبتمان
solvent	مذيب

observed	مرصود
least- squares planes	مستويات مربعات صغرى
lattice planes	مستويات شبكية
scan	مسح
X-ray sources	مصادر الشعاع السيني
design matrix	مصنوفة تصميم
orientation matrix	مصنوفة توجه أو توجيه
singular matrix	مصنوفة شاذة (منفردة)
ill- conditioning matrix	مصنوفة معتلة الشرط
observational equation	معادلات رصد (متعلقة بالرصد والمشاهدة)
Bragg equation	معادلة براغ
Sayr's equation	معادلة سايرى
Laue equation	معادلة لاوي
unique	منفرد أو وحيد
diffractometer	مقياس حيود أو جهاز قياس الحيود
profiles	مناظر جانبية
Central Limit Theorem	مبرهنة النهاية المركزية
monochromator	موحد اللونية
crystal morphology	مورفولوجية البلورة أو علم تشكل البلورة
CIF (crystallographic information file)	CIF (ملف معلومات بلورية أو كريستالوجرافية)



crystal system

نظام بلوري

analogue of diffraction,

نظير الحيود

crystal growth

نمو البلورة



geometry of molecular structure

هندسة التركيب الجزيئي

Eulerian geometry

هندسة أيوليريان

geometry of diffraction

هندسة حيود

Kappa geometry

هندسة كابا

ثانياً: إنجليزي - عربي

A

absorption	امتصاص
absorption correlation	ارتباط امتصاص
absorption edge	حافة امتصاص
air- sensitive	حساسية للجو
amplitude	سعة
analogue of diffraction,	نظير الحيود
analysis of variance	تحليل التباين
anisotropic	متباين الخواص (لا متناحي)
anomalous dispersion,	انتشار غير سوي (شاذ)
area detector	كاشف مساحة
atomic displacement	إزاحة ذرية
azimuthal angle	زاوية السمت

B

bisecting	تنصيف
block- diagonal	قطري - قالي
Bragg equation	معادلة براغ
Bragg's law	قانون براغ

Bravais lattice

شبكة برافيس



capillary tubes

أنابيب شعرية

Central Limit Theorem

مبرهنة النهاية المركزية

centring

تمركز

chiral

كيرالي

chirality

كيرالية

CIF (crystallographic information file)

CIF (ملف معلومات بلورية أو

كريستالوجرافية)

configuration

تشكيل، تشكّل

constraints

قيود

contents

محتويات

convolution

التفاف

correlation

ارتباط

crystal growth

نمو البلورة

crystal morphology

مورفولوجية أو علم تشكّل البلورة

crystal mounting

ضبط البلورة

crystal packing

تعبئة البلورة

crystal system

نظام بلوري

D

damping	تضاؤل، إخماد
database	قاعدة بيانات
density of crystals	كثافة البلورة
design matrix	مصنوفة تصميم
determination	تحديد
difference electron density	فرق كثافة إلكترونية
diffractometer	مقياس حيود أو جهاز قياس حيود
dihedral angle,	زاوية زوجية
direct methods	طرق مباشرة
disorder	خلل، عدم انتظام
displacement ellipsoid	مجسم قطع ناقص (أهليلجي) إزاحة
displacement parameters	بارامترات إزاحة

E

electron density	كثافة إلكترونية
ellipsoid	مجسم قطع ناقص (أهليلجي)
equivalent	متكافئة
Eulerian geometry	هندسة أيوليريان
extinction	إخماد

F

Fourier synthesis	تشبيد فورير
Friedel law	قانون فريدل
Friedel pairs	أزواج فريدل

G

Gaussian distribution	توزيع جاوسيان
gel crystallization	تبلور جلّ، هلامة
geometry of diffraction	هندسة حيود
geometry of molecular structure	هندسة التركيب الجزيئي
goniometer head	رأس مقياس زوايا
goodness of fit	جودة التلائم أو التوفيق
group	زمرة

H

Harker lines	خطوط هاركر
hydrogen bonding	ترابط هيدروجيني

I

ill- conditioning matrix	مصنوفة معتلة الشرط
--------------------------	--------------------

indices	أدلة، معاملات
inequality relation ships	علاقات متباينة
intensity statistic	إحصائيات شدة
international tables for crystallography	جداول دولية للكريستالوجرافيا
intermolecular interaction	تداخل بين جزيئي

K

Kappa geometry	هندسة كابا
Karle – Hauptman determinants	محددات - كارلي - هوبتمان

L

Lagrange mulipliers	ضوارب لاجرانج
lattice	شبكة
lattice centring	تمركز شبكية
lattice planes	مستويات شبكية
Laue equation	معادلة لاوي
Laue group	زمرة لاوي
least- squares planes	مستويات مربعات صغرى
least- squares refinement planes	تنقيح بالمربعات الصغرى
liquid diffusion	انتشار سائل
Lorentz- polarization corrections	تصححات استقطاب-لورنتز

M

mean	متوسط
metric symmetry,	تماثل مقاسي
microscope	مجهر
Miller indices	أدلة ميلر
molecular	جزيئي
molecular graphics,	تخطيط بياني جزيئي
monochromator	موحد اللونية
mosaic spread	انتشار فسيفسائي

N

negative quartets,	رباعيات سالبة
normal distribution	توزيع طبيعي

O

observational equation	معادلات رصدية أو شهورية (متعلقة بالرصد والمشاهدة)
observed	مرصود
occupancy factor	عامل الإشغال
optical	بصري
orientation matrix	مصفوفة توجه أو توجيه

P

parameter	بارامتر
Patterson map	خريطة باترسون
Patterson search	بحث باترسون
Patterson synthesis,	تشبيد باترسون
phase	طور
point group	زمرة نقطية
Poisson distribution	توزيع بويسون
polarity	قطبية
polarization of light	استقطاب الضوء
powder diffraction	حيود بمسحوق
precipitant	عامل مرسب (مذيب - ضد)
precision and accuracy	دقة وإتقان
profiles	مناظر
pseudo- symmetry	تماثل - كاذب

R

R- indices,	أدلة - R
random errors,	أخطاء عشوائية
reactant diffusion,	انتشار متفاعل
reciprocal lattice	شبكة معكوسة

recrystallization	إعادة البلورة
refinement	تنقيح
reflections	انعكاسات
Renninger reflection	انعكاس ريننجر
residuals	متخلفات (راسبيات)
resolution	تحليل (تفريق)
restraints	عوامل تحفظ (تحفظات)
R-factors	R-عوامل
rigid body	جسم صلب- جاسع

S

Sayr's equation	معادلة سايري
scan	مسح
scattering	تشتت
scattering factor	عامل تشتت
shift- limiting	تحديد-إزاحة
single crystal	بلورة وحيدة
singular matrix	مصفوفة شاذة (منفردة)
site occupancy factor	عامل إشغال موقع
solvent	مذيب

Soxhlet apparatus	جهاز سوكسليت
space group	زمرة فراغية
standard	قياسي
standard deviation,	انحراف قياسي (معياري)
statistical distribution	توزيع إحصائي
stereoscopy	الرؤية المجسمة
structure factor	عامل تركيب
structure refinement	تنقيح تركيب
structure solution	حل تركيب
sublimation	تسامي
synchrotron radiation	إشعاع سنكروترون
systematic absences	غيابات منهجية
systemic errors,	أخطاء منهجية

T

tangent formula	صيغة مماس
Thomson scattering	تشتت طومسون
torsion angle	زاوية التواء (فتل)
translation symmetry	تماثل انتقال
twinning	توأمة

U

uncertainty	شك
uncertainty standard	شك قياسي
unique	مفردة
unit cell	خلية وحدة تركيب

V

vapour diffusion,	انتشار بخار
variance	تباين

W

wavelength	طول الموجي
Wilson plot	رسم ويلسون

X

X-ray	شعاع سيني
X-ray photographs	صور فوتوغرافية للشعاع السيني
X-ray sources	مصادر الشعاع السيني

كشاف الموضوعات

- ارتباط ٣٨٥-٣٨٩
- ارتباط امتصاص ٣٤٢
- إزاحة، جزئي ٢٣٥
- إزاحة، ذرية، انظر بارامترات إزاحة ٥٦
- أزواج فريدل ٣٧٩-٣٨١
- استخدام في تحديد تركيب
- مطلق ٢٤٩-٢٥٠
- استقطاب الضوء، انظر أيضاً المجهر ٢٥
- إشعاع سنكروترون ٣٨٥-٣٨٨
- أشكال الاستحقاق ١٩٠-١٩٢
- أطوار (الانعكاس) ١-٢، ٤-٥، ١٢٩
- إعادة بلورة، انظر نمو بلورة ١٣
- اعتماد على درجة الحرارة ٢١
- امتصاص ٣٠، ١٠٠-١٠٢
- إحصائيات شدة ٣٧، ٤٦-٤٨
- اختزال بيانات ١٠١، ١٠٢، ٢٣١-٢٣٥
- أخطاء، عشوائي ٢٦٤-٢٦٨
- أخطاء، نظامي ١٠١، ٢٦٤-٢٦٧
- إخماد (أولي وثانوي) ١٠٦، ١٠٧، ٤١٥-٤١٦
- إخماد بصري ٢٥، ٤١
- أدلة -R، عوامل -R ٢٣١R-٢٣٢، ٢٧١
- أدلة، معاملات ٦٧-٦٩، ٢٣١
- أدلة، معاملات، ميلر، انظر أدلة ٤٨، ٥٠، ٥٦-٥٨

- أنايب شعرية ٢٤، ٢٧
انتشار فسيقائي ٢٤، ١٢٢-١٢٥
انتشار، بخار ١٧
انتشار، سائل ١٩
انتشار، غير سوي (شاذ)، انظر تشتت
غير سوي ٤٢٢
انتشار، متفاعل ١٨
انحراف، قياسي ٢١١-٢١٢
انحراف، قياسي مقدر، انظر شك
قياسي ٢٢٢
انعكاس ريننجر (حيود مضاعف) ٤٢٠
انعكاسات ٤٤
أنيزوتروبي ٣٨٤
- ٢١٥ تباين
تباين مصاحب وارتباط ٢١٨
تبلور جلّ، هلامة ١٨، ١٦٥، ٢٣٨
تجميع بيانات ٦٣-٦٩
تحديد- إزاحة انظر تضاول ٤٦-٤٧
تحفظات ١٧٤-١٧٩
تحليل (تفريق) ٢٣٣، ٢٣٦
تحليل تباين ٢٣٣
- ١٤٢ تحول فورير، تشبيد فورير ١٢٧-١٢٧
١٤٨ في تنقيح تركيب ١٤٧-١٤٨
١٥٣ في حل تركيب ١٥٢-١٥٣
تخطيط بياني، جزئي ٢١٨
تداخلات، بين جزئية ١٢٩
تدرج أو تدرج مرافق ٨٧، ٩٢
- ب
٢٣٧ بارامترات إزاحة ٢٣٥-٢٣٧
بارامترات، حراري، انظر بارامترات
إزاحة ٢٨٩
بارامترات، في تنقيح بالمربعات
الصغرى ٢١١

- ترابط هيدروجيني ٣٦
تركيب، مطلق، انظر تشكّل،
مطلق ٤١٢-٤١٣
عامل تركيب ١٢٧، ١٢٨،
١٤٢، ١٤٤
محسوب ٦
مسيويّ (معيّر) ١٣٤-١٣٥
مرصود ٤٨٥
- تعددية موقع ذرة، انظر عامل
الإشغال ١٨-١٩
تغير الطور، انتقال الطور ٨١
التفاف ٤٠٨
تمائل - كاذب ٢١٩
تمائل، لا جزئي ٣١٥
تمائل، مقاسي ٢٢١
تمرکز ٣٧
تمرکز شبكية، انظر، خلية وحدة
تركيب ٣٨
تناظر حيود، بصري ٧٨، ٨٩، ٢٣٥
تنقيح ٢٢٩
تنقيح بالمربعات الصغرى ٢١٣-٢١٩
توءمة ٣٧٥
شك، قياسي ٢٦٤
في بيانات ٨
في بارامترات منقحة ٢٢٩
في تركيب جزئي ٢٧٦-٢٧٧
توزيع بويسون ٢٥٩
- تشتت طومسون ١
تشتت، غير سوي (شاذ) ٣٠٩
تشتت، منتشر حرارياً ٢٢٥
تشكيل، تشكّل، مطلق ٨٠، ٨٢،
٢١٣، ٣٨١
تشبيد باترسون، خريطة
باترسون ١٥١-١٦٢
تصحیحات استقطاب- لورنتز ١٠٣
تضاؤل، إخماد ٤١٥
تعبة البلورة ١٤٢

حيود، مضاف، انظر انعكاس

ريننجر ٣٧٥

خ

خطوط ومستويات هاركر ١٥٩-

١٦٠

خلل، عدم انتظام ٢٣٢، ٢٣٤، ٢٣٥

د

دقة وإتقان ٢٦٤

ذ

ذرات هيدروجين ٢٣١، ٢٦٥، ٣٨١،

٤٩٦

ر

رأس مقياس زوايا ٨٠

رباعي الحلقة ٧٩

رباعيات، سالبة ٩٥، ١٥٢

رسم احتمالية، طبيعي ٢١١

توزيع جاوسي، انظر توزيع،

طبيعي ٢٥٧

توزيع، إحصائي ٢٦٢

توزيع، طبيعي ٢٦٤

ج

جداول دولية للكريستالوجرافيا ٣٦٧

جسم، صلب، جاسي ٢٢٩

جمع بيانات عند درجة حرارة

منخفضة ١٨٥

جهاز سو كسهلت ١٨

زمرة فراغية ٣٥، ٤٢، ٤٧

لدالة باترسون ١٥٦، ١٥٧

الرؤية المجسمة ١٥٨

جودة التلائم أو التوفيق ٢٣٤

ح

حافة امتصاص ١، ٣٧٩

حزمة بيانات، منفردة ٢١٤

حيود، مسحوق ١٥٦، ٢٢٧

ص

صور فوتوغرافية للشعاع السيني ٢٦

صيغة مماس ١٨١ - ١٨٤

ض

ضبط البلورة ١٣ - ١٤

ضوارب لاجرانج ٢١٦ - ٢١٧

ط

طرق، مباشرة ١٧١

الطول الموجي لشعاع سيني ٢

في تشييد فورير ١٢٧

في تنقيح بالمربعات

الصغرى ٢١٣

في قيم وسطية ٢١٥

في تنقيح تركيب ٢١٤

ع

عامل إشغال موقع ٢٩٨، ٢٩٩

رسم ويلسون ١٨٥ - ١٨٦، ٤٢٢

ز

زاوية التواء (فتل). تماثل انتقال ١٨٦

زاوية، السَّمت ٢٦٩

زاوية، زوجية ٢٦٤

زمرة لاوي ٥١، ٥٤ - ٥٥

زمرة نقطية ٥١، ٥٤، ٦٦

س

ساعات ٦ - ٧

في تشييد فورير ٤١٢

في طرق مباشرة ١٢٩

في تنقيح تركيب ٢٢٩

ش

شبكة ٤

شبكة برافيس، انظر تمرکز خلية وحدة

تركيب ٣٨

شبكة، معكوسة ٥٥، ٢١٣

- عامل تشتت، ذري، انظر أيضاً، غير
سوي ١٤٧-١٤٨
- عامل درجة حرارة، انظر بارامترات
إزاحة ٢٨٦
- عامل مرسب (مذيب- ضد) ١٤-١٥
- علاقات متباينة ٢١١-٢١٦
- عينة، حساسة للجو ١٧
- قواعد بيانات ٣٦٧
- قيم-E، انظر عامل تركيب،
مسوي ١٨٥، ٢١٢
- قيود ١٧٤
- في طرق مباشرة ١٧٤-١٧٩
- في تنقيح ٢٣٨

ك

- كثافة البلورة ٣٨-٣٩
- كثافة إلكترونية ٣٨-٣٩، ٢٢٩-
- ٢٣٠
- من تشييد فورير ١٢٧-١٢٨
- من طرق مباشرة ١٧١-١٧٢
- وأنثروبيا قصوى ٢٠٠
- كبرالية ٣٦

ل

- لا متغيرات للتركيب ٢٢٨
- لتركيب بلوري ٣٩١
- لخلية وحدة تركيب ٣٩٥

غ

- غيابات، منهجية ٣٥، ٢١٨

ف

- فرق كثافة إلكترونية ١٧٤، ١٧٨
- في تنقيح تركيب ٢٢٩

ق

- قانون براغ (معادلة براغ) ٩
- قانون فريدل ٦-٧، ٣٧٩
- قطبية، نقطة أصل عائمة ١، ١١٢
- قطري- قالي ٢١٦، ٢١٨

- مبادئ وتشغيل ٣٩٢
- مبرهنة نهاية مركزية ٢٢١
- متخلفات (راسبيات) ٢١٣-٢١٥
- متكافئ بالتماثل، انظر انعكاسات، متكافئ ٦٧-٦٨
- متكافئة ١٨٩-١٩١
- متوسط ٢٥٧
- مجسم قطع ناقص (أهليليجي) إزاحة ٥٤-٥٦
- مجسم قطع ناقص (أهليليجي)، حراري، انظر مجسم قطع ناقص (أهليليجي) إزاحة ٢٨٩-٢٩٠
- مجهر ٢٥-٢٦
- محتويات ١
- محددات-كارلي-هوبتمان ١٧٦
- مذيب ١٧
- مساحة، كاشف. خصائص واستخدامات ٨٤، ٩٢
- مستوى دلالة في اختبارات إحصائية ١٨٤، ١٨٩
- مستويات بمربعات صغرى ١٨٧
- مستويات شبكية ٢٥
- مسح، سمّي، انظر زاوية السمّت ٤٨
- مصادر الشعاع السيني ٣٨٤
- مصفوفة تصميم ٢١٥
- مصفوفة توجه أو توجيه ٦٩
- مصفوفة معتلة الشرط وشاذة (منفردة) ٢٢٥
- مصفوفة، شاذة، انظر معتلة الشرط ٢٢٥
- معادلات رصد (متعلقة بالرصد والمشاهدة) ١٠٥
- معادلات لاوي ٦٥
- معادلات، طبيعية ١٠٥
- معادلة سايري ١٧٤
- مقياس حيود ٢٢١
- ملف معلومات كريستالوجرافية (CIF) ٣٥٩، ٣٦٢

٥

وحدة تركيب، (لا تماثلية) ٤٤، ٥٣

مناظر انعكاس جانبية ٢٢٤

مواقع، عامة وخاصة ٣٨١

موحد اللونية ٢٦٩

مورفولوجية (شكل) البلورة ١٨

موقع، تصنيف ٩٦

٦

نشر ٢٣٨

نظام بلوري ٣٨

نقطة الأصل، عائم، انظر قطبية ٢٢٩

نمو البلورة ٢٥

نموذج، راكب ٢٣٨

نهاية صغرى، موضعي ١٦٢، ١٧٤

٧

هندسة أيوليريان ٣٦٢، ٤٩١

هندسة تركيب جزئي ٢١٧

هندسة حيود ١٨٥

هندسة كابا ٢١٧