

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

اصول بلورشناسی

تعیین ساختار

تک بلور و پودر

نانو ساختارها و پروتئین ها

تالیف

دکتر علیرضا عباسی

دکتر شکوفه گرانمایه

توجه

این کتاب مشمول قانون حمایت از حقوق مؤلفان و مصنفان است. تکثیر کتاب به هر روش اعم از فتوکپی، ریسوگرافی، تهیه فایل های pdf، لوح فشرده، بازنویسی در وبلاگ ها، سایت ها، مجله ها و کتاب، بدون اجازه کتبی ناشر مجاز نیست و موجب پیگرد قانونی می شود.



انتشارات دانشگاه تهران

شماره ۳۳۸۷

شماره مسلسل ۷۶۱۹

سرنامیه	: عباسی، علیرضا، ۱۳۵۲ -
عنوان و نام پدیدآور	: اصول بلورشناسی: تعیین ساختار تک بلور و پودر نانوساختارها و پروتئین‌ها / تألیف علیرضا عباسی، شکوفه گرانمایه.
مشخصات نشر	: تهران: دانشگاه تهران، مؤسسه انتشارات، ۱۳۹۲.
مشخصات ظاهری	: ۵، ۱۸۴ ص: مصور، جدول، نمودار.
فروست	: انتشارات دانشگاه تهران: شماره انتشار، ۳۳۸۷.
شابک	: 978-964-03-6437-6
وضعیت فهرست‌نویسی	: فیا.
پادداشت	: واژه نامه.
یادداشت	: کتابنامه: ج ۱۷۱ - ۱۷۳.
عنوان دیگر	: تعیین ساختار تک بلور و پودر نانوساختارها و پروتئین‌ها.
موضوع	: بلورشناسی.
موضوع	: پروتئین - - ساختار.
شماره افزوده	: گرانمایه، شکوفه، ۱۳۹۲ -
شماره افزوده	: دانشگاه تهران، مؤسسه انتشارات.
رده‌بندی کنگره	: ۱۳۹۲ الف ۶ / ۲ / ۲ QD ۹۰۵
رده‌بندی دیویی	: ۵۴۸
شماره کتابشناسی ملی	: ۳۱۵۳۱۴۴

ISBN-978-964-03-6437-6



9 789640 364376

عنوان: اصول بلورشناسی؛ تعیین ساختار تک‌بلور و پودر نانو ساختارها و پروتئین‌ها

تألیف: دکتر علیرضا عباسی - شکوفه گرانمایه

ویراستار: فاطمه جهانگیری

نویس چاپ: اول

تاریخ انتشار: ۱۳۹۲

شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه

ناشر: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران

چاپ و صحافی: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران

«مسئولیت صحت مطالب کتاب با مؤلفان است»

«کلیه حقوق برای ناشر محفوظ است»

بها: ۸۰۰۰۰ ریال

خیابان کارگر شمالی - خیابان شهید فرش مقدم - مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران

پست الکترونیک: press@ut.ac.ir - سایت: <http://press.ut.ac.ir>

بخش و فروش: تلفکس ۸۸۰۱۲۰۷۸

تقدیم به:

خانواده‌هایمان

که این کتاب حاصل صبر آنهاست

فهرست مطالب

پیشگفتار..... ر

فصل اول - بلورها و حالت بلورین

۱-۱- مقدمه..... ۱

فصل دوم - پرتو X

۱-۲- منشأ..... ۷

۲-۲- جذب و صاف کردن..... ۱۰

۳-۲- انتخاب منبأ تابش..... ۱۳

۴-۲- لامپ پرتو X : ساختمان و هندسه..... ۱۴

۵-۲- تابش سینکروترون..... ۱۵

۶-۲- ایمنی..... ۱۶

فصل سوم - پراش پرتو X

۱-۳- شبکه و صفحات..... ۱۹

۲-۳- اندیس‌های میلر..... ۲۱

۳-۳- معادله براگ..... ۲۴

۴-۳- شبکه معکوس..... ۲۵

۱-۴-۳- بردارهای شبکه معکوس..... ۲۶

۲-۴-۳- سلول واحد شبکه معکوس..... ۲۷

۳-۴-۳- معادله براگ در شبکه معکوس..... ۳۰

۴-۴-۳- سلول‌های شبکه معکوس برای بلورهای مکعبی..... ۳۱

فصل چهارم - روش‌های تجربی

۱-۴- عوامل مؤثر در رشد بلور..... ۳۳

۲-۴- روش‌های رشد بلور..... ۳۵

۱-۲-۴- تبخیر آرام..... ۳۵

۲-۲-۴- سرد کردن آرام..... ۳۶

۳۶	۳-۲-۴- نفوذ بخار.....
۳۷	۴-۲-۴- نفوذ حلال.....
۳۷	۵-۲-۴- تصعید.....
۳۸	۶-۲-۴- همرفت.....
۳۹	۷-۲-۴- کمک‌بلورکننده.....
۳۹	۸-۲-۴- ذوب.....

فصل پنجم - تقارن و گروه‌های فضایی

۴۱	۱-۵- سیستم‌های بلوری و تقارن.....
۴۹	۲-۵- شبکه‌های غیر ساده.....
۵۲	۳-۵- گروه‌های نقطه‌ای.....
۵۳	۴-۵- گروه‌های فضایی.....
۵۵	۱-۴-۵- گروه‌های نقطه‌ای 1.....
۵۵	۲-۴-۵- گروه‌های فضایی $P1$
۵۵	۳-۴-۵- گروه فضایی $P\bar{1}$
۵۶	۴-۴-۵- گروه نقطه‌ای 2.....
۵۶	۵-۴-۵- گروه فضایی $P2$
۵۶	۶-۴-۵- گروه فضایی $P2_1$
۵۷	۷-۴-۵- گروه فضایی $C2$
۵۷	۸-۴-۵- گروه نقطه‌ای m
۵۷	۹-۴-۵- گروه فضایی Pm
۵۸	۱۰-۴-۵- گروه فضایی Pc
۵۸	۱۱-۴-۵- گروه فضایی Cm
۵۹	۱۲-۴-۵- گروه فضایی Cc
۵۹	۱۳-۴-۵- گروه نقطه‌ای $2/m$
۵۹	۱۴-۴-۵- گروه فضایی $P2/m$
۶۰	۱۵-۴-۵- گروه فضایی $P2_1/m$
۶۰	۱۶-۴-۵- گروه فضایی $P2/c$
۶۱	۱۷-۴-۵- گروه فضایی $P2_1/c$

۶۱..... ۱۸-۴-۵ - گروه فضایی C2/m.....

فصل ششم - روش‌های دستگاهی و تجربی

۶۳..... ۱-۶ - منبع تابش.....

۶۴..... ۲-۶ - موازی‌ساز.....

۶۴..... ۳-۶ - جهت‌یاب و سرجه‌یاب.....

۶۴..... ۴-۶ - سیستم گرمایش.....

۶۵..... ۵-۶ - قطع‌کننده پرتو.....

۶۵..... ۶-۶ - دوربین.....

۶۵..... ۷-۶ - آشکارساز.....

۶۶..... ۱-۷-۶ - فیلم.....

۶۶..... ۲-۷-۶ - صفحه تصویر.....

۶۷..... ۳-۷-۶ - آشکارساز جفت‌شده باردارشده.....

۶۸..... ۸-۶ - انتخاب بلور.....

۷۰..... ۹-۶ - سوار کردن بلور.....

۷۲..... ۱۰-۶ - تراز نوری.....

۷۳..... ۱۱-۶ - اندازه‌گیری خواص بلور.....

فصل هفتم - جمع‌آوری و پالایش داده‌ها

۷۵..... ۱-۷ - شرایط آزمایش.....

۷۵..... ۲-۷ - تابش.....

۷۶..... ۱-۲-۷ - دما.....

۷۶..... ۲-۲-۷ - شرایط دیگر.....

۷۶..... ۳-۷ - آماده‌سازی برای جمع‌آوری داده‌ها.....

۷۷..... ۴-۷ - پارامترها.....

۷۷..... ۱-۴-۷ - نوع و پهنای پویش.....

۷۷..... ۲-۴-۷ - روزنه آشکارساز.....

۷۷..... ۳-۴-۷ - سرعت جمع‌آوری.....

۷۸..... ۴-۴-۷ - خطاهای سیستمی بزرگ.....

۷۸..... ۵-۷ - کاهش داده‌ها.....

۷۸.....	۷-۵-۱- تصحیح لورنتز.....
۷۹.....	۷-۵-۲- فاکتور قطبیدگی.....
۷۹.....	۷-۵-۳- تصحیح جذب.....

فصل هشتم - انتقال فوریه

۸۱.....	۸-۱- حرکت هامونیک ساده.....
۸۲.....	۸-۲- امواج، بردارها و اعداد مرکب.....
۸۴.....	۸-۳- انطباق امواج.....
۸۷.....	۸-۴- فاکتور ساختار.....
۸۹.....	۸-۴-۱- فاکتور ساختار در فرم برداری.....
۹۰.....	۸-۵- تبدیل فوریه.....

فصل نهم - حل و پالایش داده‌ها

۹۸.....	۹-۱- روش مستقیم.....
۹۸.....	۹-۲- روش پترسون.....
۱۰۱.....	۹-۳- پالایش ساختار.....
۱۰۱.....	۹-۳-۱- روش‌های فوریه.....
۱۰۵.....	۹-۳-۲- پالایش به روش حداقل مربعات.....
۱۰۷.....	۹-۴- پارامترهای جابه‌جایی ناهمسانگرد (ADP).....
۱۰۸.....	۹-۵- کاهش تعداد پارامترها و افزایش تعداد داده‌ها.....
۱۰۹.....	۹-۶- پارامترهای جابه‌جایی.....
۱۱۰.....	۹-۷- رهایی.....
۱۱۰.....	۹-۸- اتم‌های هیدروژن.....

فصل دهم - روش پودر

۱۱۳.....	۱۰-۱- مقدمه.....
۱۱۶.....	۱۰-۲- روش لو.....
۱۱۶.....	۱۰-۳- روش دبای-شرر.....
۱۱۸.....	۱۰-۴- تفکیک صفحات.....
۱۱۹.....	۱۰-۵- شاخص‌گذاری انعکاس‌ها.....
۱۲۱.....	۱۰-۶- معادله شرر.....

۱۲۳	۷-۱۰- مثال معادله شرر
۱۲۵	۸-۱۰- مزایای XRD
۱۲۵	۹-۱۰- محدودیت‌ها
۱۲۵	۱۰-۱۰- تجزیه کمی

فصل یازدهم- مواد نانو متخلخل با چارچوب‌های فلز-آلی (MOF)

۱۲۷	۱-۱۱- مقدمه
۱۲۸	۲-۱۱- مواد متخلخل
۱۲۹	۳-۱۱- چارچوب‌های فلز-آلی
۱۳۰	۴-۱۱- سنتز MOF ها
۱۳۱	۱-۴-۱۱- واکنشگرها
۱۳۳	۲-۴-۱۱- شرایط واکنش دما-فشار-زمان (pH)
۱۳۴	۵-۱۱- انواع روش‌های سنتز MOF ها
۱۳۴	۱-۵-۱۱- روش سالوترمال
۱۳۴	۲-۵-۱۱- روش نفوذ بخار
۱۳۵	۳-۵-۱۱- روش مخلوط کردن مستقیم
۱۳۵	۴-۵-۱۱- روش مخلوط دو فازي از حلال
۱۳۵	۵-۵-۱۱- روش سنتز الکتروشیمیایی
۱۳۵	۶-۵-۱۱- روش سنتز میکرو ویو
۱۳۶	۷-۵-۱۱- روش سنتز یونوترمال
۱۳۶	۶-۱۱- طراحی MOF ها
۱۳۷	۷-۱۱- چارچوب‌های فلز-آلی هم‌شبکه (IRMOF)
۱۳۸	۸-۱۱- چارچوب‌های فلز-آلی معکوس (IMOF)
۱۳۹	۹-۱۱- چارچوب‌های اکسید فلز-آلی (MOOFs)
۱۴۰	۱۰-۱۱- دسته بندی MOF ها
۱۴۰	۱۱-۱۱- تفاوت چارچوب‌های فلز-آلی با پلیمرهای کئوردیناسیونی (CP)
۱۴۱	۱۲-۱۱- شناسایی و بررسی ساختار MOF ها
۱۴۱	۱-۱۲-۱۱- پراش پرتو X تک بلور
۱۴۱	۲-۱۲-۱۱- پراش پرتو X پودر و آنالیز توزین حرارتی
۱۴۲	۳-۱۲-۱۱- طیف‌سنجی مادون قرمز (IR)

۱۴۲.....	۱۱-۱۲-۴- میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)
۱۴۲.....	۱۱-۱۲-۵- آنالیز مساحت سطح ویژه.....
۱۴۴.....	۱۱-۱۳-۱۳- برخی خواص و کاربردهای MOFها.....
۱۴۴.....	۱۱-۱۳-۱- جذب و ذخیره سازی.....
۱۴۷.....	۱۱-۱۳-۲- جداسازی.....
۱۴۷.....	۱۱-۱۳-۳- خواص کاتالیزوری.....
۱۴۸.....	۱۱-۱۳-۴- خواص اعطاف پذیری.....
۱۴۹.....	۱۱-۱۳-۵- خواص مغناطیسی.....
۱۵۰.....	۱۱-۱۳-۶- خواص فرومغناطیسی.....
۱۵۰.....	۱۱-۱۳-۷- خواص آنتی فرومغناطیسی.....
۱۵۱.....	۱۱-۱۳-۸- خواص رسانایی.....
۱۵۱.....	۱۱-۱۳-۹- خواص نوری.....
۱۵۲.....	۱۱-۱۳-۱۰- MOFها به عنوان حامل های انتقال دارو.....
۱۵۳.....	۱۱-۱۴- مزایا و معایب MOFها.....

فصل دوازدهم - توپولوژی

۱۵۵.....	۱۲-۱- مقدمه.....
۱۵۶.....	۱۲-۲- شناسایی توپولوژی.....

فصل سیزدهم - بلورشناسی پروتئین

۱۶۷.....	۱۳-۱- مقدمه.....
۱۶۸.....	۱۳-۲- بلورهای پروتئین.....
۱۶۹.....	۱۳-۳- اصول تبلور پروتئین ها.....
۱۷۳.....	۱۳-۴- مقدار حلال بلورهای پروتئین.....
۱۷۴.....	۱۳-۵- روش های سرمایی.....
۱۷۵.....	۱۳-۶- تهیه مشتقات ایزومورفی اتم های سنگین.....

۱۷۹.....	- منابع.....
۱۸۱.....	- واژه نامه.....

پیشگفتار

خداوند بزرگ را شکر و سپاس می‌گوئیم که این توفیق را به ما عنایت فرمود تا کتاب "اصول بلورشناسی، در تعیین ساختار تک بلور و پودر نانو ساختارها و پروتئین‌ها" را به دانشجویان و علاقمندان علم بلورشناسی که قابل استفاده در علوم مختلف از جمله نانو است تقدیم کنیم.

شناسایی و مطالعه دقیق مواد در توجیه رفتار آن‌ها و همچنین جهت بهبود ساختار به منظور نیل به کاربردی بهتر و وسیع‌تر از اهمیت خاصی برخوردار است. بلورشناسی بهترین روش شناسایی مواد در صورت امکان شکل‌گیری آن‌ها بصورت بلورین است. بسیاری از ترکیبات طبیعی و یا سنتزی در علوم مختلف از جمله نانو امکان بلوری شدن را دارا هستند. مواد نانو متخلخل با چارچوب فلز-آلی (MOF) از جمله مواد در حوزه فناوری نانو بوده که قابل بلوری شدن هستند. در نتیجه نقطه تلاقی دانش نانو و بلورشناسی شناسایی این مواد نانو متخلخل با کمک علم بلورشناسی است.

در این کتاب ابتدا به اصول بلورشناسی و مفاهیم پراش پرتو X و کاربرد آن در تعیین ساختار مواد تک بلور و پودری و سپس به نقطه مشترک این علم با مواد نانو و نیز بررسی توپولوژی آن‌ها و در نهایت توضیحات مقدماتی در رابطه با بلورشناسی پروتئین‌ها پرداخته می‌شود.

هدف دیگر این کتاب بیان مفاهیم ثقیل این علم به زبانی ساده و روان به منظور بهره‌وری هر چه بیشتر خوانندگان بوده است.

در پایان سپاسگزار خواهیم بود اگر خوانندگان محترم اینجانبان را از ارائه نظریات و انتقادات سازنده خود محروم نفرمایند.

مؤلفین

بهمن ماه ۱۳۹۱