



آشنایی با
بلورشناسی پرتوهای ایکس

مایکل ام. وولفسون

ترجمه عزت‌الله ارضی

مرکز نشر دانشگاهی



An Introduction to X-Ray Crystallography
Second Edition
Michael M. Woolfson
Cambridge University Press, 1997

آشنایی با بلورشناسی پرتوهای ایکس
تألیف مایکل ام. وولفسون
ترجمه دکتر عزت الله ارضی (عضو هیئت علمی دانشگاه تهران)
ویراسته دکتر منیژه رهبر
طراح جلد: بهرام کاووسی راد
نسخه پرداز: فاطمه پیوندی
حروفچین و صفحه آرا: منیژه دیارمند
ناظر چاپ: خشایار نصیری منش
مرکز نشر دانشگاهی
چاپ اول ۱۳۸۸
تعداد ۱۰۰۰
لیتوگرافی، چاپ و صحافی: وسمه
۹۸۰۰ تومان
حق چاپ برای مرکز نشر دانشگاهی محفوظ است

فهرست نویسی پیش از انتشار کتابخانه ملی جمهوری اسلامی ایران

سرشناسه: وولفسون، مایکل ام. Woolfson, M. M.
عنوان و نام پدیدآور: آشنایی با بلورشناسی پرتوهای ایکس / مایکل ام. وولفسون؛ ترجمه عزت الله ارضی.
مشخصات نشر: تهران: مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۷.
مشخصات ظاهری: هفت، ۵۰۵ ص.؛ مصور.
فروست: مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۱۵. فیزیک؛ ۱۳۶.
شابک: 978-964-01-1315-8
وضعیت فهرست نویسی: فیا
یادداشت: عنوان اصلی: An introduction to X-ray crystallography, 1997.
یادداشت: کتابنامه: ص. ۴۹۳ - ۴۹۶
یادداشت: نمایه
موضوع: بلورشناسی یا اشعه ایکس
شناسه افزوده: ارضی، عزت الله، ۱۳۲۲ -
شناسه افزوده: مرکز نشر دانشگاهی
رده بندی کنگره: ۱۳۸۷ ۹۱۵/۹ QD۹۴۵
رده بندی دیویی: ۵۴۸/۸۲
شماره کتابشناسی ملی: ۱۶۲۱۸۲۲

بسم الله الرحمن الرحيم

فهرست

صفحه	عنوان
۱	پیشگفتار ویراست اول
۳	پیشگفتار ویراست دوم
۵	۱ هندسه حالت بلورین
۵	۱.۱ سیمای کلی بلورها
۶	۲.۱ تقارن خارجی بلورها
۱۲	۳.۱ هفت سیستم بلوری
۱۵	۴.۱ سی و دو رده بلوری
۱۹	۵.۱ یاخته واحد
۲۳	۶.۱ شاخصهای میلر
۲۵	۷.۱ شبکه های فضایی
۲۹	۸.۱ عناصر تقارن
۳۳	۹.۱ گروه فضایی
۴۳	۱۰.۱ گروه فضایی و رده بلوری
۴۳	مسائل فصل ۱

۴۵	پراکندگی پرتوهای ایکس	۲
۴۵	۱.۲ توصیف کلی فرایند پراکندگی	
۴۸	۲.۲ پراکندگی از یک جفت نقطه	
۵۱	۳.۲ پراکندگی از توزیع کلی متشکل از پراکنده‌سازهای نقطه‌ای	
۵۲	۴.۲ پراکندگی تامسون	
۵۸	۵.۲ پراکندگی کامپتون	
۶۰	۶.۲ پراکندگی پرتوهای ایکس به وسیله اتمها	
۶۶	مسائل فصل ۲	
۶۸	پراش از یک بلور	۳
۶۸	۱.۳ پراش از آرایه یک‌بعدی اتمها	
۷۶	۲.۳ پراش از آرایه دوبعدی اتمها	
۷۸	۳.۳ پراش از آرایه سه‌بعدی اتمها	
۸۱	۴.۳ شبکه معکوس	
۸۸	۵.۳ پراش از بلور-عامل ساختمانی	
۹۱	۶.۳ قانون برگ	
۹۸	۷.۳ عامل ساختمانی برحسب شاخصهای بازتابش	
۱۰۰	مسائل فصل ۳	
۱۰۳	تبدیل فوریه	۴
۱۰۳	۱.۴ سری فوریه	
۱۰۷	۲.۴ کاربرد عددی سری فوریه	
۱۱۳	۳.۴ سری فوریه در دو و سه بعد	
۱۱۶	۴.۴ تبدیل فوریه	
۱۲۵	۵.۴ پراش و تبدیل فوریه	
۱۲۶	۶.۴ پیچش	
۱۳۲	۷.۴ پراش از توزیع دورهای	
۱۳۲	۸.۴ معادله چگالی الکترونی	
۱۴۱	مسائل فصل ۴	

۱۴۳	۵	گردآوری تجربی داده‌های پراش
۱۴۳	۱.۵	شرایط زح‌دادن پراش
۱۴۹	۲.۵	دوربین پودری
۱۵۶	۳.۵	دوربین نوسانی
۱۶۴	۴.۵	دوربین وایزنبرگ
۱۷۴	۵.۵	دوربین قدیمی
۱۷۸	۶.۵	اندازه‌گیری شدتها به روش عکسبرداری
۱۸۴	۷.۵	پراش‌سنجها
۱۸۸	۸.۵	چشمه‌های پرتوهای ایکس
۱۹۷	۹.۵	سیستمهای صفحه-تصویر
۱۹۹	۱۰.۵	روش نوین لاوه
۲۰۲		مسائل فصل ۵
۲۰۴	۶	عوامل مؤثر در شدت پرتوهای ایکس
۲۰۴	۱.۶	پراش از بلوری چرخان
۲۱۳	۲.۶	جذب پرتوهای ایکس
۲۲۱	۳.۶	استهلاک اولیه
۲۲۷	۴.۶	استهلاک ثانویه
۲۲۹	۵.۶	عامل دما
۲۳۵	۶.۶	پراکندگی غیرعادی
۲۴۵		مسائل فصل ۶
۲۴۷	۷	تعیین گروههای فضایی
۲۴۷	۱.۷	آزمونهایی برای نبود مرکز تقارن
۲۵۶	۲.۷	ویژگیهای نوری بلورها
۲۶۹	۳.۷	تقارن عکسهای پرتوهای ایکس
۲۷۲	۴.۷	اطلاعات حاصل از غیبتهای نظام‌مند
۲۷۹	۵.۷	آمار شدت
۲۹۴	۶.۷	آشکارسازی صفحه‌های آینه‌ای و محورهای دوباره

۲۹۷	مسائل فصل ۷
۲۹۹	۸ تعیین ساختمانهای بلوری
۲۹۹	۱.۸ روشهای آزمون و خطا
۳۰۴	۲.۸ تابع پترسون
۳۲۱	۳.۸ روش اتم-سنگین
۳۲۷	۴.۸ جایگزینی همریخت
۳۴۳	۵.۸ کاربرد پراکندگی غیرعادی
۳۵۳	۶.۸ رابطه‌های نامساوی
۳۶۴	۷.۸ رابطه‌های علامت
۳۷۴	۸.۸ رابطه‌های کلی فاز
۳۸۲	۹.۸ مرور کلی روشها
۳۸۳	مسائل فصل ۸
۳۸۸	۹ فرایندهای دقت و پالایش
۳۸۸	۱.۹ تعیین پارامترهای یاخته واحد
۳۹۷	۲.۹ مقیاس‌بندی داده‌های مشاهده شده
۴۰۰	۳.۹ پالایش فوریه
۴۰۹	۴.۹ پالایش حداقل مربعات
۴۱۳	۵.۹ روش انتقال-پارامتر
۴۱۵	مسائل فصل ۹
۴۱۹	جدولها و ثابتهای فیزیکی
۴۲۱	پیوستها
۴۶۱	جواب مسئله‌ها
۴۹۳	مراجع
۴۹۵	کتابشناسی
۴۹۷	نمایه

پیشگفتار ویراست اول

در ۱۹۱۲ فون لاوه اظهار نظر کرد که پرتوهای ایکس می‌توانند از بلورها پراشیده شوند، و اندکی بعد آزمایشی که این پیش‌بینی درخشان را تأیید کرد به اجرا گذاشته شد. در آن زمان تمام پیامدهای این کشف نمی‌توانست به طور کامل احساس شود. پیشرفت در این زمینه که از حل ساختمانهای بلوری ساده که با دویا سه پارامتر توصیف می‌شدند آغاز شده بود، به طور مداوم ادامه یافته است تا نقطه‌ای که هم اکنون بسیاری از ساختمانهای زیست‌شناختی پیچیده حل شده‌اند و حل ساختمانهای برخی از ویروسهای بلورین قریب‌الوقوع است.

بلورشناسی پرتوهای ایکس گاهی اوقات به خودی خود به عنوان یک علم در نظر گرفته می‌شود و، در حقیقت، بسیاری از بلورشناسان حرفه‌ای تمام کوشش خود را وقف گسترش این زمینه و فعالیت حرفه‌ای در آن می‌کنند. از طرف دیگر، برای بسیاری از دانشمندان دیگر فقط یک ابزار است و از این دیدگاه، نقطه تلاقی بسیاری از رشته‌ها مثل ریاضی، فیزیک، شیمی، زیست‌شناسی، داروسازی، زمین‌شناسی، متالورژی، فناوری تار نوری و... به شمار می‌رود. با وجود این، برای بلورشناس، مرزهای مرسوم بین موضوعهای علمی اغلب نامشخص به نظر می‌رسد.

در نوشتن این کتاب هدف این بوده است که یک متن درسی مقدماتی فراهم آید تا در خدمت دانشجوی دوره کارشناسی یا کارشناسی ارشد که مطالعه‌ای جدی درباره این موضوع را برای اولین بار آغاز می‌کند قرار گیرد. هیچ کوششی نشده است که در عمق با متون درسی تخصصی، که برخی از آنها در قسمت کتاب‌شناسی فهرست شده‌اند، رقابت شود. در حقیقت، احساس هم شده است که پسندیده‌تر آن است که گستره بررسی محدود شود. از این رو، موضوعهای بسیار مرتبطی که بیرون از چهارچوب عنوان کتاب قرار می‌گیرند — مثلاً پراش از مواد نیمه بلوری و نابلورین، پراش الکترون و نوترون — حذف شده‌اند. برای آنهایی که مایل نیستند بیشتر از این پیش بروند، امید می‌رود که

این کتاب متن سراسر است، وسیع، و به خودی خود کاملی باشد که اصول دربرگیرنده را توضیح دهد و وضعیت کنونی را توصیف کند. برای آنهایی که مایلند بیشتر پیش بروند، این کتاب باید به عنوان زیربنای مطالعه بعدی تلقی شود.

اینک روشن شده است که دستگاه واحدهای SI به طور گسترده‌ای مورد پذیرش است و به طور کلی هم در این کتاب مورد استفاده قرار گرفته است. با وجود این، واحد آنگستروم به عنوان واحد طول برای طول موج پرتوهای ایکس و ابعاد یاخته واحد و غیره نگه داشته شده است، چرا که تعداد زیادی آثار مکتوب این واحد را به کار می‌برند. توضیح مختصری از دستگاه SI و بعضی از ثابتها و معادله‌های مهم در بخش جدولها و ثابتهای فیزیکی در صفحات پایانی کتاب گنجانده شده است.

مایکل وولفسون

پیشگفتار ویراست دوم

از زمانی که نخستین ویراست این کتاب در ۱۹۷۰ چاپ شد تا به حال پیشرفتهای بسیار زیادی در بلورشناسی با پرتوهای ایکس رخ داده است. بیشتر این پیشرفتها در اثر گسترشهای فناوری بوده است — مثلاً چشمه‌های جدید و قدرتمند سینکروترونی پرتوهای ایکس، آشکارسازهای پیشرفته‌تر، و افزایش توان کامپیوترها با ضریب چندین مرتبه بزرگی. دوشادوش این گسترشها و گاهی اوقات در اثر آنها، پیشرفتهای نظری، به‌ویژه در روشهای حل ساختمانهای بلوری نیز وجود داشته است. در ویراست دوم، این جنبه‌های نوین موضوع گنجانده شده و در سطحی توصیف شده است که مناسب ماهیت این کتاب، که هنوز هم متن درسی مقدماتی است، باشد.

یک ویژگی جدید این ویراست این است که از دسترس بودن آسان کامپیوترهای قدرتمند رومیزی برای نشان دادن فرایندهای بلورشناسی پرتوهای ایکس، به کمک برنامه‌های کامپیوتری فورترنی، بهره گرفته شده است. این برنامه‌ها در پیوستهای کتاب فهرست شده‌اند و روی شبکه جهانی اینترنت* هم قابل دست‌یابی‌اند. در عین حال که این برنامه‌ها به کاربردهای دوتبعدی محدود شده‌اند، در مورد تمام گروههای فضایی دوتبعدی به‌کار می‌روند و به‌طور کامل اصول برنامه‌های سه‌تبعدی پیچیده‌تر را، که در دسترس‌اند، نشان می‌دهند. بعضی از مسئله‌های موجود در انتهای فصلها به‌گونه‌ای است که خواننده می‌تواند این برنامه‌ها را در آنها به کار ببرد و مراحل شبیه‌سازی حالهای ساختمانی را طی نماید — شبیه‌سازی از این لحاظ که ساختمان معلوم مورد استفاده قرار می‌گیرد تا آنچه معادل است با داده‌های مشاهده شده تولید شود. اگر خوانندگان دو تا دو تا کار کنند تمرینهای واقعیت‌تری را می‌توان تولید کرد، یکی از آنها یک پرونده داده‌ها را که شامل داده‌های مشاهده شده شبیه‌سازی شده برای ساختمان ساختمانی اختراعی خودش است در اختیار دیگری قرار می‌دهد، درحالی‌که این یکی باید حل آن را پیدا کند. این کار می‌تواند تفریح خوبی باشد در عین اینکه خیلی آموزشی هم هست!

مایکل وولفسون

یورک ۱۹۹۶

* <http://www.cup.cam.ac.uk/onlinepubs/412714/412714top.html>