

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Πρόλογος	11
1. Συμμετρία	13
1.1. Εισαγωγή	13
1.2. Ισομετρικοί μετασχηματισμοί	15
1.3. Στοιχεία Συμμετρίας	16
1.4. Πλέγματα	21
1.5. Πολλαπλότητα της κυψελίδας	24
1.6. Κρυσταλλικές διευθύνσεις και επίπεδα	25
1.7. Πλεγματική περιοδικότητα και συμμετρία	29
1.8. Ομάδες συμμετρίας σημείου	31
1.8.1. Συμβολισμός Schönflies	35
1.8.2. Μορφολογία	36
1.8.3. Συμμετρία φυσικών ιδιοτήτων	39
1.8.4. Κεντροσυμμετρικές ιδιότητες	40
1.9. Ομάδες συμμετρίας χώρου	43
1.9.1. Πλέγματα Bravais	44
1.9.2. Διαγράμματα των ομάδων συμμετρίας χώρου	50
1.9.3. Υπολογισμός της πολλαπλότητας της κυψελίδας	55
1.9.4. Επιλογή της αρχής	59
1.9.5. Πίνακες και συμμετρία	59
2. Η χρήση του Διανυσματικού Λογισμού στην Κρυσταλλοδομή	65
2.1. Εξωτερικό γινόμενο δυο διανυσμάτων	65
2.2. Μικτό γινόμενο τριων διανυσμάτων	66
2.3. Δισεξωτερικό γινόμενο I	68
2.4. Δισεξωτερικό γινόμενο II	69
2.5. Εσωτερικό γινόμενο δυο εξωτερικών γινομένων	69
2.6. Εξωτερικό γινόμενο δυο εξωτερικών γινομένων	69
2.7. Εσωτερικό γινόμενο πολλαπλών εξωτερικών γινομένων	69
2.8. Ο μετρικός τανυστής	69

2.9. Αποστάσεις Ατόμων και Γωνίες Δεσμών	71
3. Αντίστροφο πλέγμα	73
3.1. Γενικά	73
3.2. Υπολογισμοί των παραμέτρων	73
3.3. Η ισαπόσταση των επιπέδων του ευθέος και το διάνυσμα του αντι- στρόφου πλέγματος	78
3.4. Οι Σχέσεις των Παραμέτρων των δυο πλεγμάτων στα Κρυσταλλικά Συστήματα	80
3.5. Γωμετρική κατασκευή του αντιστρόφου πλέγματος	84
4. Ακτίνες X	87
4.1. Παραγωγή των ακτίνων X	87
4.2. Λυχνίες ακτίνων X	88
4.3. Γεννήτριες περιστρεφόμενης ανόδου	94
4.4. Ακτινοβολία σύγχροτρον	98
4.4.1. Μετασηματισμοί Lorentz χώρου-χρόνου	102
4.4.2. Μετασηματισμοί Lorentz ταχυτήτων	104
4.4.3. Μετασηματισμοί Lorentz συχνοτήτων	105
4.4.4. Μετασηματισμοί Lorentz γωνιών	108
4.4.5. Ακτινοβολία επιταχνομένου φορτίου	109
4.4.6. Κώνος εκπομπής	114
4.4.7. Σχετικιστικό φαινόμενο Doppler	116
4.4.8. Η ακτίνα περιστροφής σε δακτύλιο μαγνητών κύρτωσης	118
4.4.9. Η διάρκεια του παλμού μεσα από μαγνήτη κύρτωσης	119
4.4.10. Κρίσιμη ενέργεια	121
4.4.11. Διατάξεις παρεμβολής	124
4.4.11.1. Διατάξεις Μαγνητών Wigglers	125
4.4.11.2. Διατάξεις Μαγνητών Undulators	126
4.5. Απορρόφηση	136
4.6. Μονοχρωματισμός και ευθυγράμμιση ακτίνων X	137
4.7. Περίθλαση των ακτίνων X από την ύλη	138
4.8. Η Περίθλαση και το αντίστροφο πλέγμα	140
5. Περιθλασιμετρία	145
5.1. Περιθλασίμετρα μονοκρυστάλλων 4 κύκλων	145
5.2. Ανιχνευτές πεδίου	150

5.2.1. Ανιχνευτές αερίου	152
5.2.2. Ανιχνευτές οθόνης	155
5.2.3. Ανιχνευτές δίσκου εικόνας	158
6. Κρυστάλλωση	163
6.1. Γενικά	163
6.2. Τεχνικές κρυστάλλωσης	165
7. Διάδοση του φωτός μέσα στους κρυστάλλους	170
7.1. Γενικά	170
7.2. Κρυσταλλική συμμετρία και ελλειψοειδές των δεικτών διάθλασης	171
7.3. Οι κρύσταλλοι στο πολωτικό μικροσκόπιο	174
7.4. Επιλογή κρυστάλλου	176
8. Κύματα	179
8.1. Μέτρο και φάση	179
8.2. Ενταση και πλάτος	181
8.3. Σκεδαστική ικανότητα	182
8.4. Επίδραση της θερμοκρασίας	183
8.5. Παράγων δομής	186
8.6. Η αρχή του Friedel	188
8.7. Το πρόβλημα των φάσεων	190
9. Συλλογή των Δεδομένων	193
9.1. Ανέβασμα του κρυστάλλου	193
9.2. Γεωμετρία και λειτουργία του περιθλασιμέτρου 4 κύκλων	194
9.3. Ο Πίνακας προσανατολισμού του κρυστάλλου	196
9.4. Συλλογή δεδομένων	200
9.4.1. Ισοδύναμες ανακλάσεις	202
9.5. Αναγωγή των δεδομένων	205
9.6. Συστηματικές κατασβέσεις	208
9.7. Αντιστοιχίες των κεντρωμένων πλεγμάτων	212
10. Αμεσοί μέθοδοι	219
10.1. Ορισμοί	219
10.2. Ανισότητες	222
10.3. Μέθοδοι πιθανοτήτων	225
11. Συνάρτηση Patterson	225
12. Ισόμορφη αντικατάσταση	229

13. Ανώμαλη σκέδαση	231
13.1. Η ανώμαλη σκέδαση και το πρόβλημα των φάσεων	234
14. Μοριακή αντικατάσταση	237
15. Βελτίωση των φάσεων	237
15.1. Τροποποίηση πυκνότητας	239
15.2. Χάρτες διαφορών	241
15.3. Κρυσταλλογραφικά πακέτα προγραμμάτων	243
16. Βελτίωση των παραμέτρων της δομής	245
16.1. Βελτίωση των παραμέτρων της Δομής στα μικρά μόρια	245
16.2. Δυσχέρειες στην βελτίωση των παραμέτρων μακρομορίων	246
16.3. Στερεοχημικοί περιορισμοί και εξαναγκασμοί	247
16.4. Βελτίωση της δομής με στερεοχημικούς περιορισμούς	247
Βιβλιογραφία	252