

# Δομή μορίου: ορισμοί

## Αυστηρός ορισμός :

Δομή ενός μορίου είναι η σχετική διευθέτηση στον τρισδιάστατο χώρο των ατόμων από τα οποία αποτελείται το μόριο.

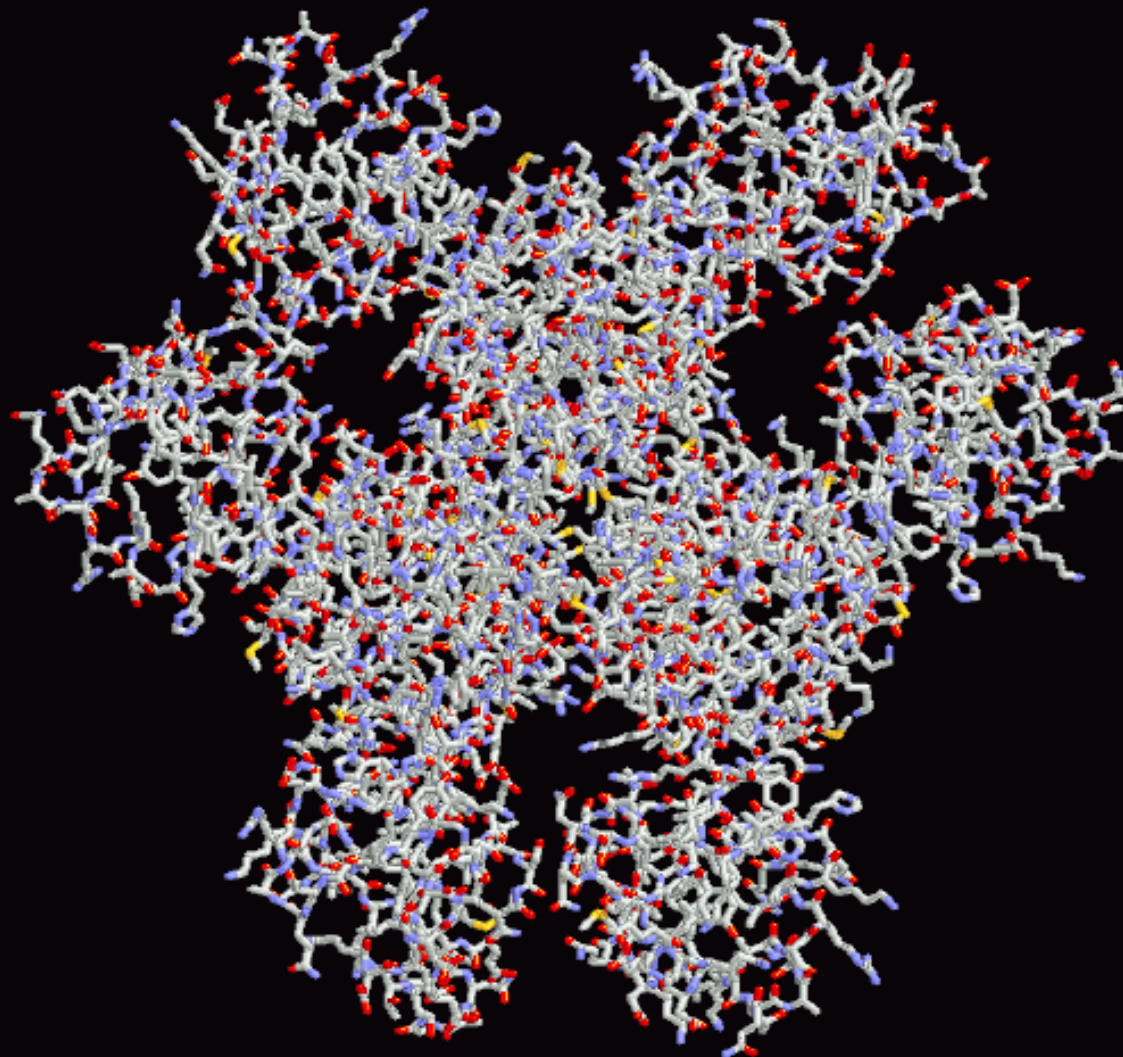
Με άλλα λόγια, γνώση της δομής ενός μορίου σημαίνει ότι γνωρίζουμε που βρίσκεται κάθε άτομο του μορίου σε σχέση με όλα τα άλλα άτομα.

Μια τέτοιου τύπου περιγραφή δεν είναι πάντα εφικτή, και για μερικές τεχνικές (π.χ. ηλεκτρονική μικροσκοπία αρνητικής χρώσης) είναι αδύνατη.

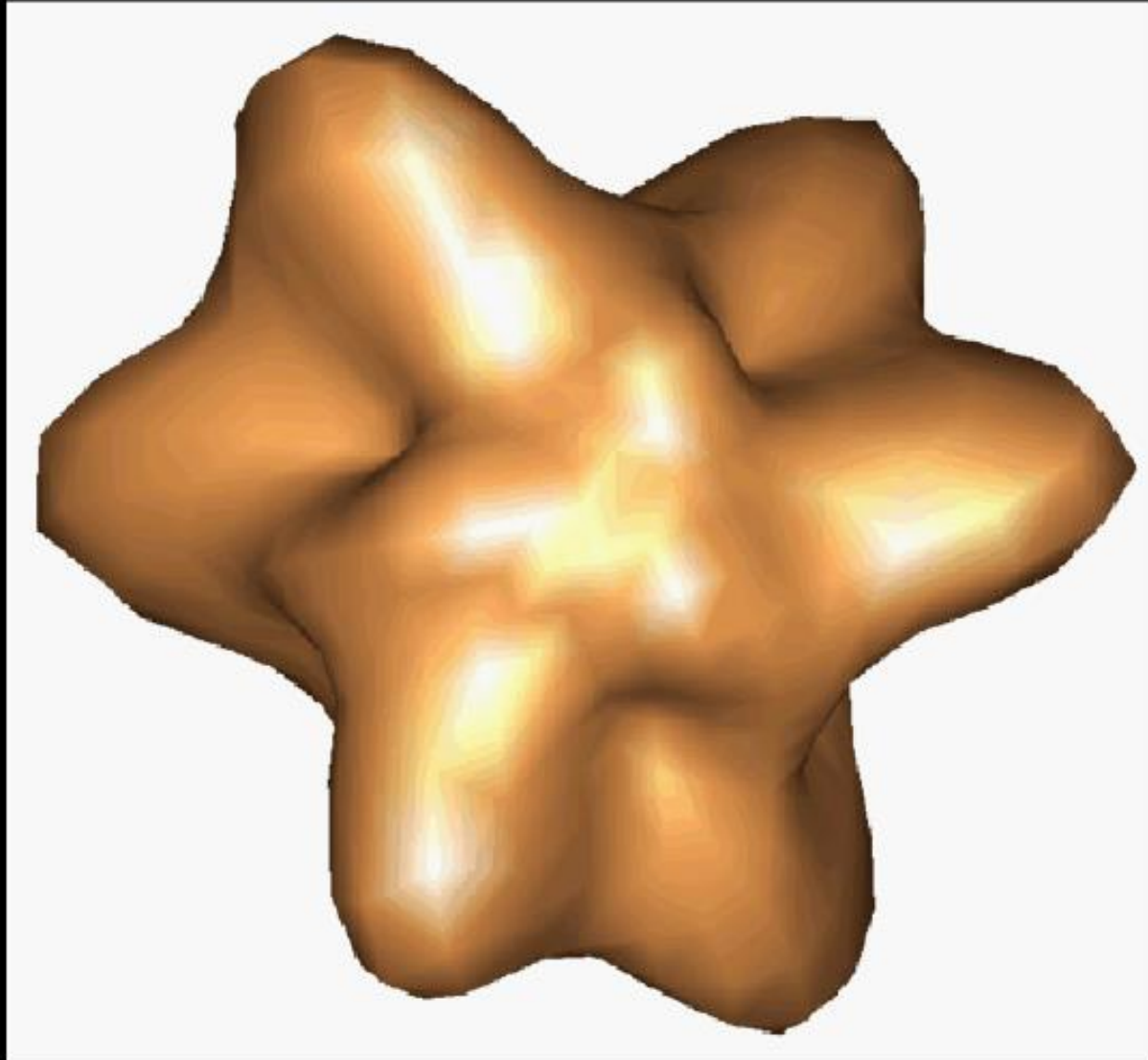
# Δομή μορίου: ορισμοί

Σε τέτοιες περιπτώσεις αυτό που αναφέρεται στην βιβλιογραφία ως "δομή", δεν είναι η σχετική διευσθέτηση στον τρισδιάστατο χώρο των ατόμων από τα οποία αποτελείται το μόριο, αλλά μια συνάρτηση (π.χ. ηλεκτρονική πυκνότητα) που προκύπτει από τη δομή, και συνήθως αντιστοιχεί σε μια χαμηλής διακριτικότητας αναπαράσταση του μορίου (σχήμα, μορφή επιφάνειας).

# Διακριτικότητα (ευκρίνεια ?)



# Διακριτικότητα (ευκρίνεια ?)



# Διακριτικότητα (ευκρίνεια ?)

Είναι ένα μέτρο της "λεπτομέρειας" που υπάρχει σε ένα είδωλο ενός αντικειμένου.

Ακριβέστερα, είναι η ελάχιστη απόσταση προσέγγισης δύο ορατών σημείων ενός ειδώλου πριν αυτά (φαινομενικά) ενωθούν σε ένα.

Η διακριτικότητα έχει μονάδα μήκους. Στην δομική βιολογία η καθολικά χρησιμοποιούμενη μονάδα μήκους είναι το Angstrom :  $1\text{A} = 0.1\text{nm} = 0.0001\mu\text{m} = 10^{(-10)}\text{m}$  το οποίο είναι περίπου ίσο με την διάμετρο του ατόμου του υδρογόνου.

# Διακριτικότητα (ευκρίνεια ?)

## Διακριτικότητα (A)

## Είδωλο

< 0.8

Υπερ-ατομική διακριτικότητα.  
Τροχιακά ίσως ορατά.

< 1.4

Ατομική διακριτικότητα.  
Άτομα μεταξύ τους διακριτά.

< 2.0

Υψηλή διακριτικότητα.  
Ακριβή ατομικά μοντέλα.

< 3.5

Χαμηλή και μέση διακριτικότητα  
Ατομικά μοντέλα εφικτά.

< 9.0

Χαμηλή διακριτικότητα.  
Ατομικά μοντέλα ανέφικτα.  
α-έλικες ορατές ως κύλινδροι.

> 9.0

Πολύ χαμηλή διακριτικότητα.  
Μορφή μορίου.



# Φυσική => Δομική => Κυτταρική

Από άποψη διακριτικότητας, η δομική βιολογία ξεκινά από εκεί που τελειώνει η ατομική φυσική, και τελειώνει εκεί που αρχίζει (σχεδόν) η κυτταρική βιολογία. Υπάρχουν περιπτώσεις αλληλοεπικάλυψης, π.χ. δομές βιομακρομορίων σε διακριτικότητα 0.6Å (ορατά δεσμικά ηλεκτρόνια) ή κυτταρικά οργανίδια (ή ιοί) με δομή γνωστή σε ατομικό επίπεδο.

# Μοριακή δυναμική

---

Από αυτή τη σκοπιά, οι καλύτερες δομές (αυτές με την περισσότερη πληροφορία για την δυναμική του μορίου) είναι αυτές που προκύπτουν από τη μέθοδο του πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (NMR), αν και οι προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής θεωρούνται πλέον αρκούντως αξιόπιστες για την εξαγωγή συμπερασμάτων (ξεκινώντας από κρυσταλλογραφικά προσδιορισμένες δομές).

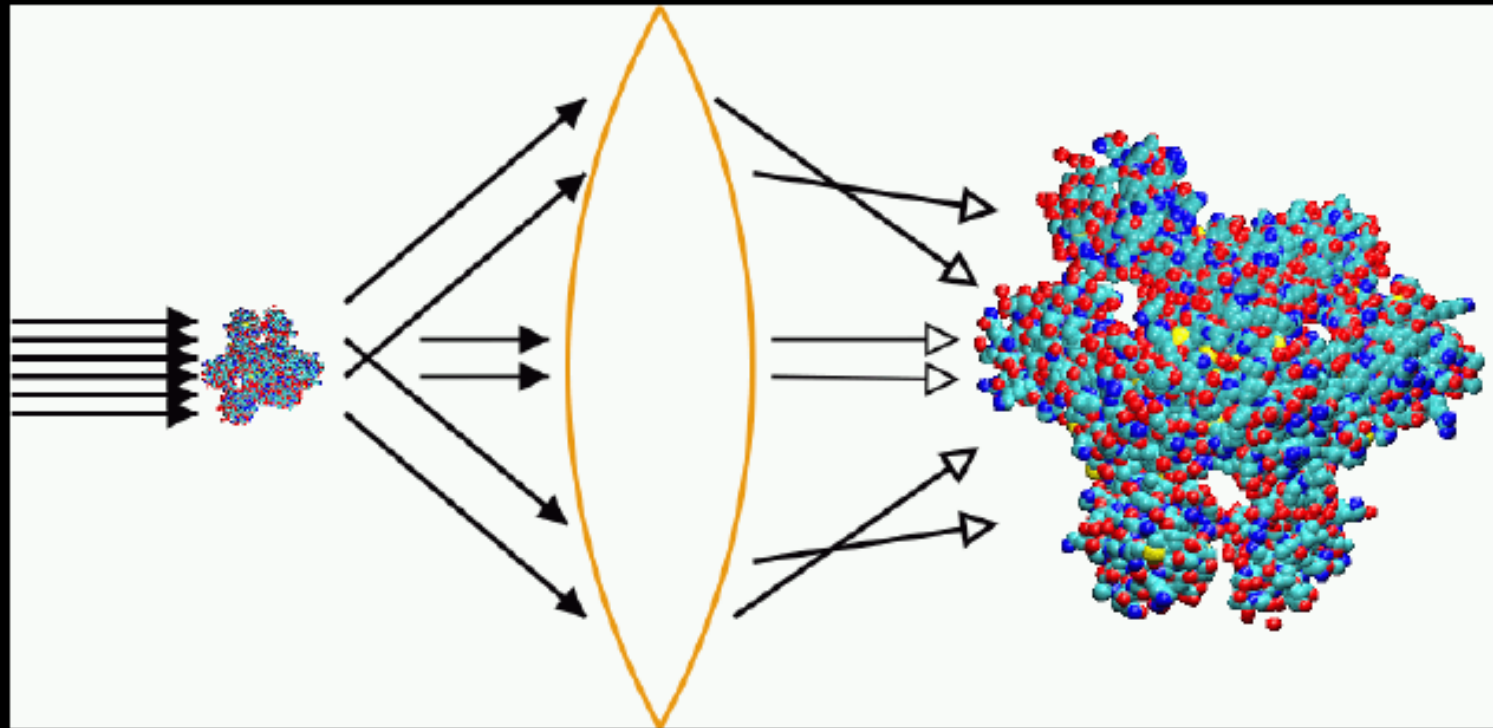


# Το κρυσταλλογραφικό ζητούμενο

Αυτό που επιδιώκουμε είναι να μπορούμε να δούμε κάποιο βιομακρομόριο σε ατομική διακρίτικότητα.

Το "δούμε" χρησιμοποιείται με την σημασία της οπτικής, δηλαδή αυτό που επιδιώκουμε να επιτύχουμε είναι την δημιουργία ενός ειδώλου του μορίου στο οποίο (είδωλο) να είναι διακριτά τα άτομα που αποτελούν το μόριο.

# Το ιδεατό πείραμα



έχει προβλήματα ...

# Προβλήματα ...

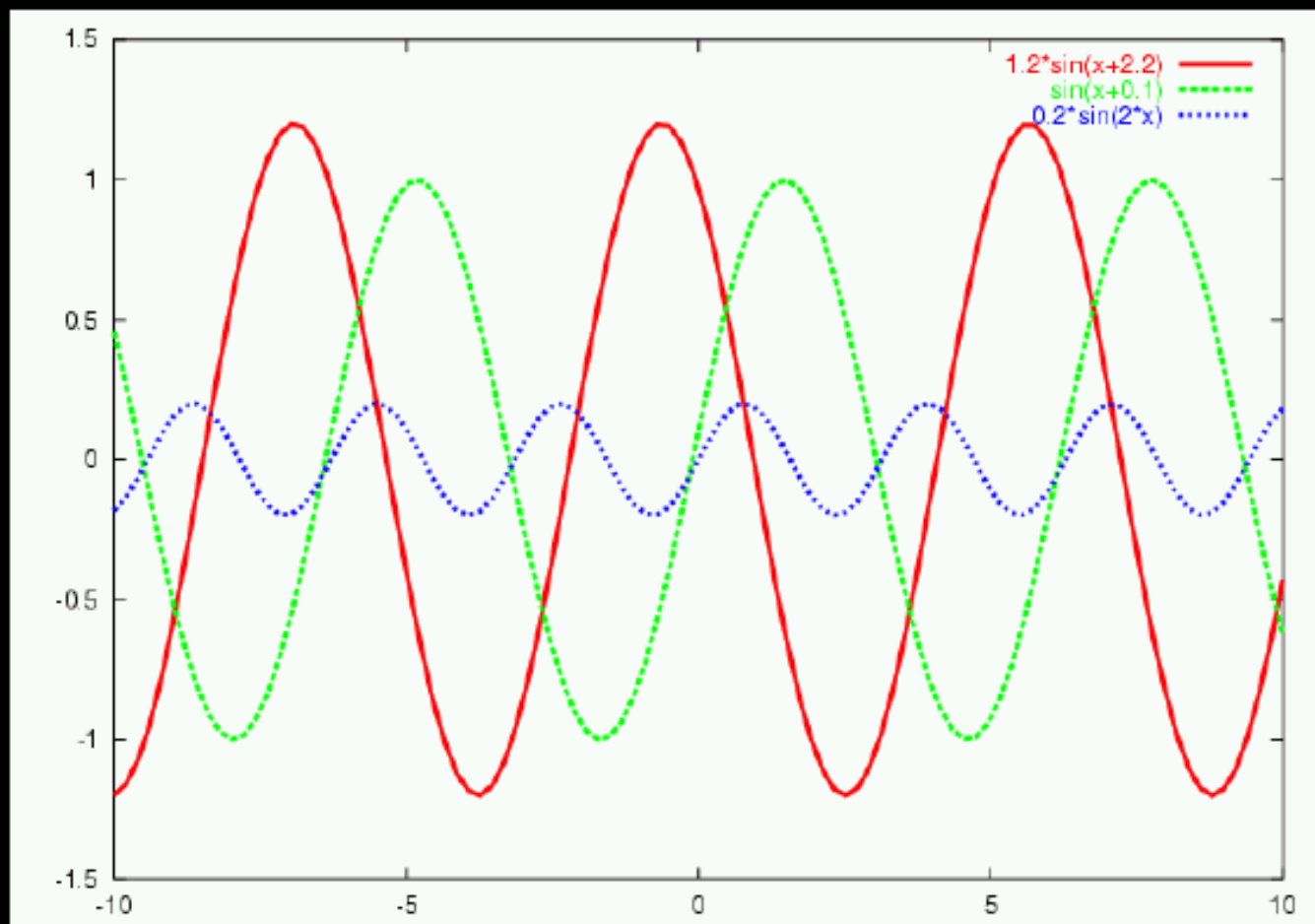
- Τι ακτινοβολία πρέπει να χρησιμοποιήσουμε ώστε να είναι εφικτή η ζητούμενη ατομική διακριτικότητα ;
- Πως θα απομονώσουμε ένα και μόνο ένα μόριο και πως θα το σταθεροποιήσουμε σε μια καλά καθορισμένη θέση ;
- Πως θα μπορέσουμε να περιστρέφουμε το μόριο κατά βούληση ώστε να είμαστε σε θέση (από τις διαφορετικές προβολές) να συμπεράνουμε τη δομή του στον τρισδιάστατο χώρο ;
- Θα είναι αρκετά ισχυρό το σήμα από ένα μόνο μόριο ώστε να μπορέσουμε να το "δούμε" ;
- Τι φακούς θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε ;

# Μήκος κύματος

- Στο ιδεατό πείραμα, το είδωλο του αντικειμένου προκύπτει από την υπέρθεση (συνδυασμό) των ακτίνων που σκεδάζονται από το αντικείμενο.
- Ο (ιδανικός) φακός δεν τροποποιεί το μήκος κύματος.
- Εάν η ακτινοβολία που χρησιμοποιούμε στο πείραμα είναι μονοχρωματική (δηλ. υπάρχει ένα και μόνο ένα μήκος κύματος), τότε το ερώτημα είναι :  
Ποιά είναι η σχέση ανάμεσα στο μήκος κύματος αυτής της ακτινοβολίας και τη μέγιστη δυνατή διακριτικότητα του ειδώλου ;

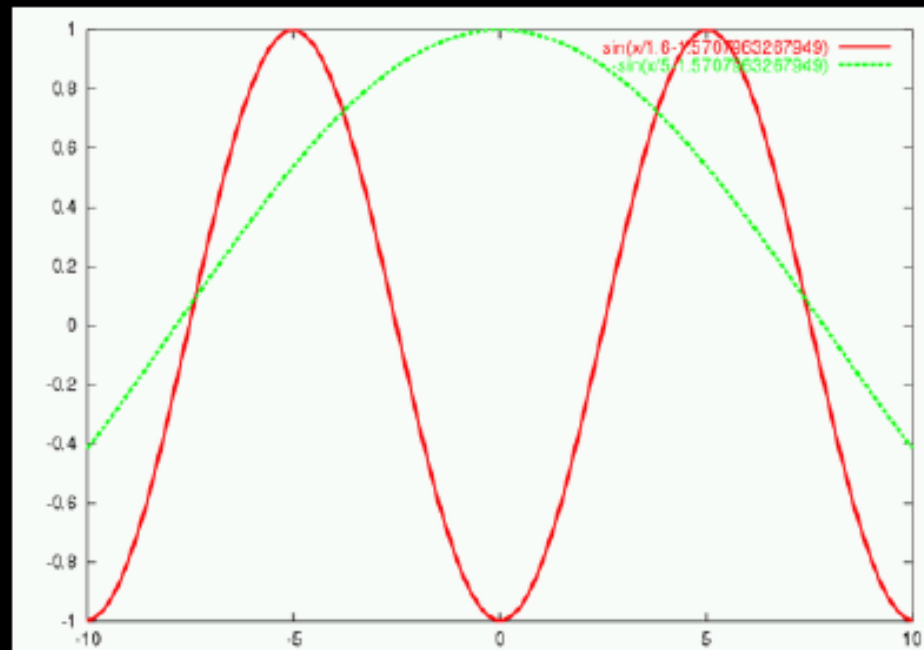
# Κύματα και μήκος κύματος

Ένα κύμα περιγράφεται πλήρως από : πλάτος, φάση, μήκος κύματος ( $v=c/\lambda$ ) και διεύθυνση διάδοσης.



# Κύματα και μήκος κύματος

Η μέση απόσταση μεταξύ ομοιοπολικά συνδεδεμένων ατόμων στα βιομακρομόρια είναι περίπου  $1.4\text{\AA}$ . Για να επιτύχουμε ατομική διακριτικότητα λοιπόν, χρειαζόμαστε ένα μήκος κύματος περίπου ίσο με τέτοιου μήκους αποστάσεις, δηλ.  $\sim 1\text{\AA}$ .





# Μήκος κύματος

Ένα μήκος κύματος  $\sim 1\text{\AA}$  αντιστοιχεί με την περιοχή του φάσματος που είναι γνωστή ως "ακτίνες X".  
Κατάλληλα (ισοδύναμα) μήκη κύματος έχουν επίσης ταχέως κινούμενα ηλεκτρόνια και θερμικά νετρόνια.

Ερμηνεία του "ακτίνων-X" ή "νετρονίων" ή "ηλεκτρονίων".

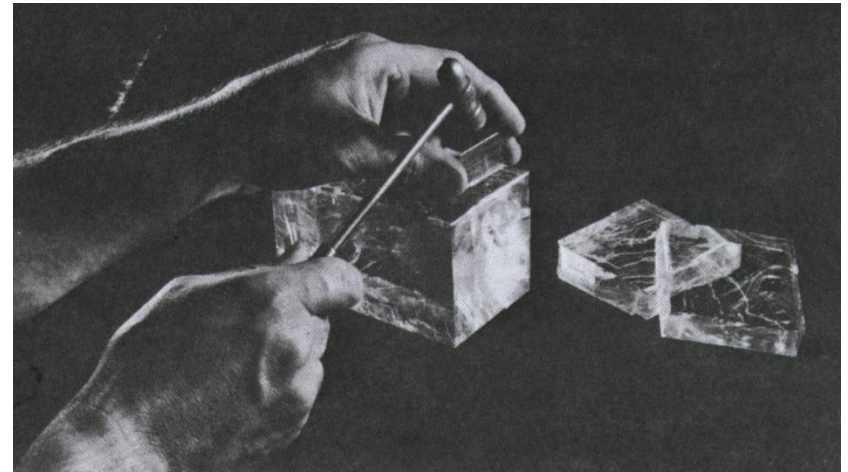
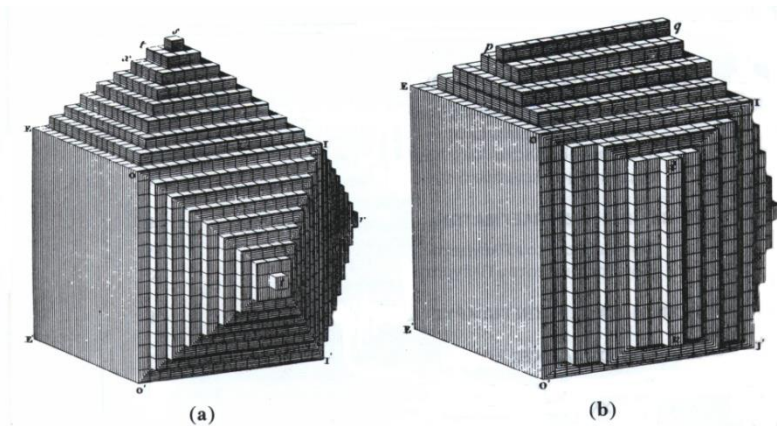
## Προβλήματα [2] ...

- Πως θα απομονώσουμε ένα μόνο μόριο και πως θα το σταθεροποιήσουμε σε μια καλά καθορισμένη θέση ;
- Πως θα μπορέσουμε να περιστρέφουμε το μόριο κατά βούληση ώστε να είμαστε σε θέση (από τις διαφορετικές προβολές) να συμπεράνουμε τη δομή του στον τρισδιάστατο χώρο ;
- Θα είναι αρκετά ισχυρό το σήμα από ένα μόνο μόριο ώστε να μπορέσουμε να το "δούμε" ;

Και τα τρία αυτά προβλήματα λύνονται με την βοήθεια των κρυστάλλων (εξ ου "κρυσταλλογραφία").

## ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΣΤΕΡΕΑ - ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ

Τι γνώριζαν για τους κρυστάλλους:



**Πρώτοι παρατηρητές:**

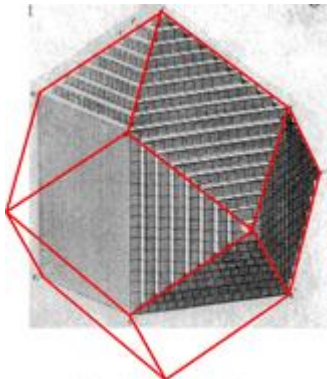
Κανονικότητα της εξωτερικής μορφής των κρυστάλλων

→ οι κρύσταλλοι σχηματίζονται από την κανονική επανάληψη ταυτόσημων δομικών μονάδων.

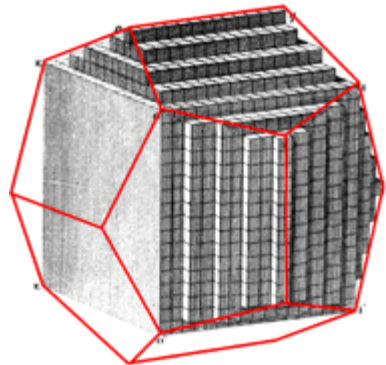
**18ος αιώνας:** Οι ορυκτολόγοι ανακάλυψαν ότι οι δείκτες των διευθύνσεων όλων των επιφανειών ενός κρυστάλλου είναι ακριβώς ακέραιοι.

**19ος αιώνας:** Ο Haüy έδειξε ότι η τακτοποίηση των σωματιδίων σε μια τρισδιάστατη περιοδική διάταξη θα μπορούσε να δώσει ένα νόμο σχετικά με τους φυσικούς ή ακέραιους δείκτες.

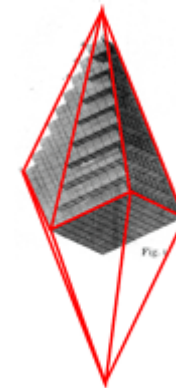
**→ Οι δομικές αυτές μονάδες είναι άτομα ή ομάδες ατόμων, δηλαδή, ένας κρύσταλλος είναι μια τρισδιάστατη περιοδική διάταξη ατόμων.**



Rhomb-dodecahedron



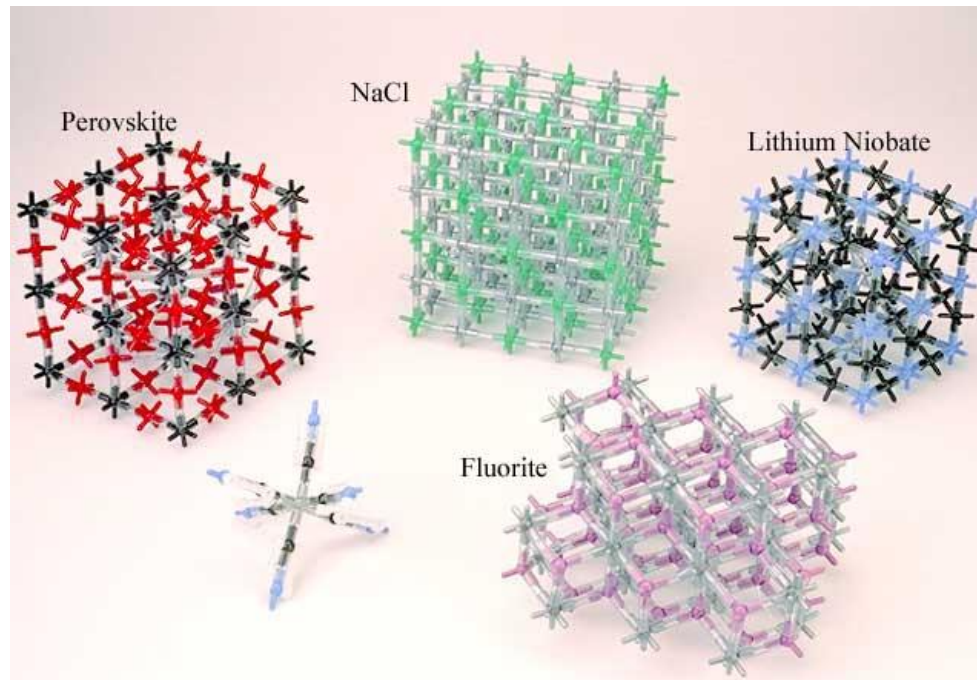
Pentagon-dodecahedron



Scalenohehedron

# ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ

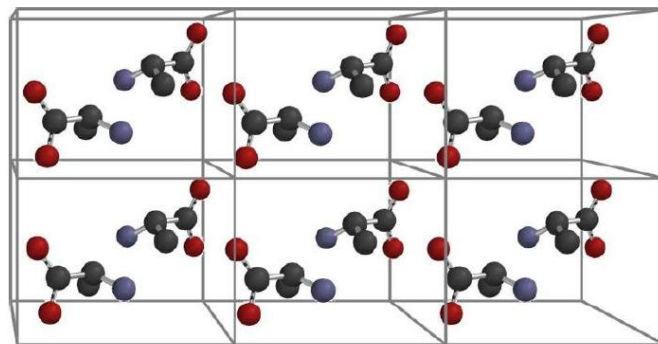
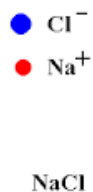
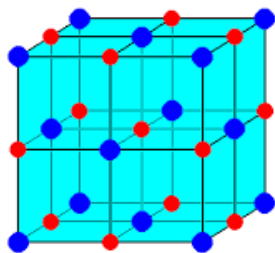
Οι κρύσταλλοι είναι μία φάση της στερεάς κατάστασης που χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη μιας περιοδικής διευθέτησης (στις τρεις διαστάσεις) των ατόμων και μορίων που αποτελούν τον κρύσταλλο.



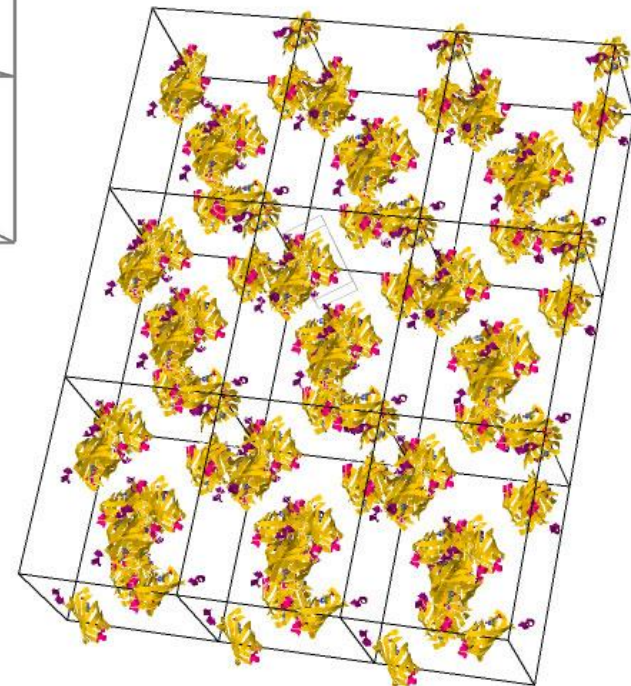
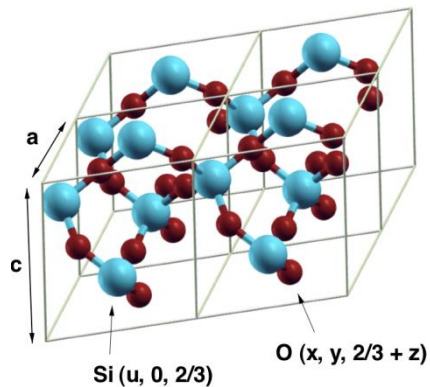


# ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ

Οι κρύσταλλοι δημιουργούνται μέσω της επανάληψης με απλή μετάθεση (δηλαδή χωρίς περιστροφή) ενός βασικού μοτίβου που έχει το σχήμα ενός παραλληλεπίπεδου το οποίο ονομάζεται **στοιχειώδης ή μοναδιαία κυψελίδα**. Διαδοχικές κυψελίδες (στον τρισδιάστατο χώρο) είναι μεταξύ τους πανομοιότυπες τόσο σε διαστάσεις όσο και σε περιεχόμενα και συγκροτούν το μακροσκοπικό αντικείμενο που ονομάζεται “κρύσταλλος”

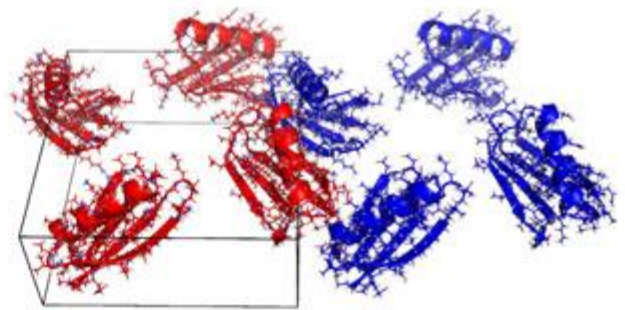
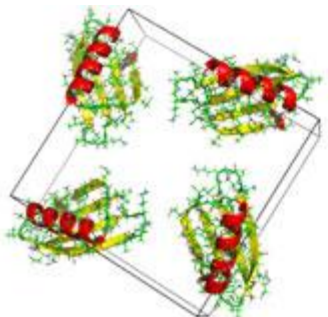
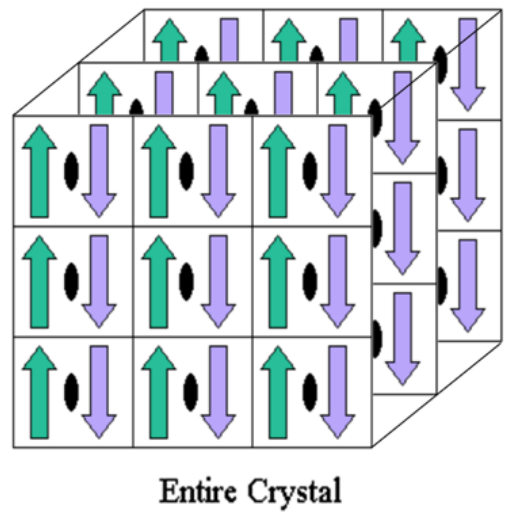
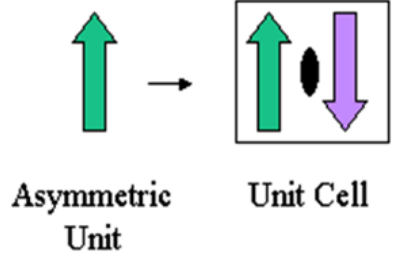
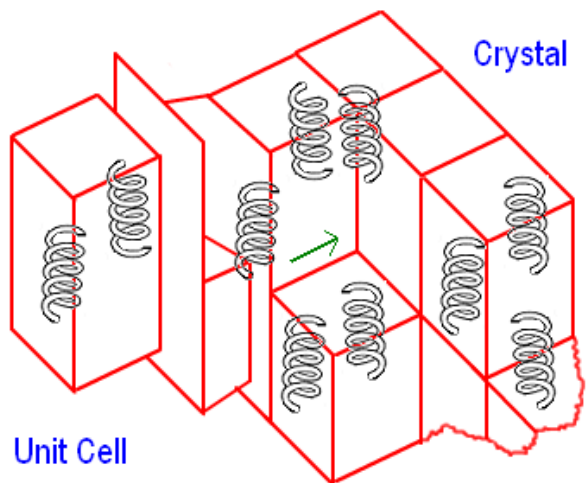


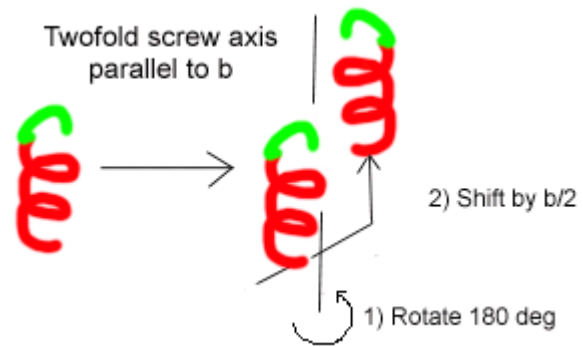
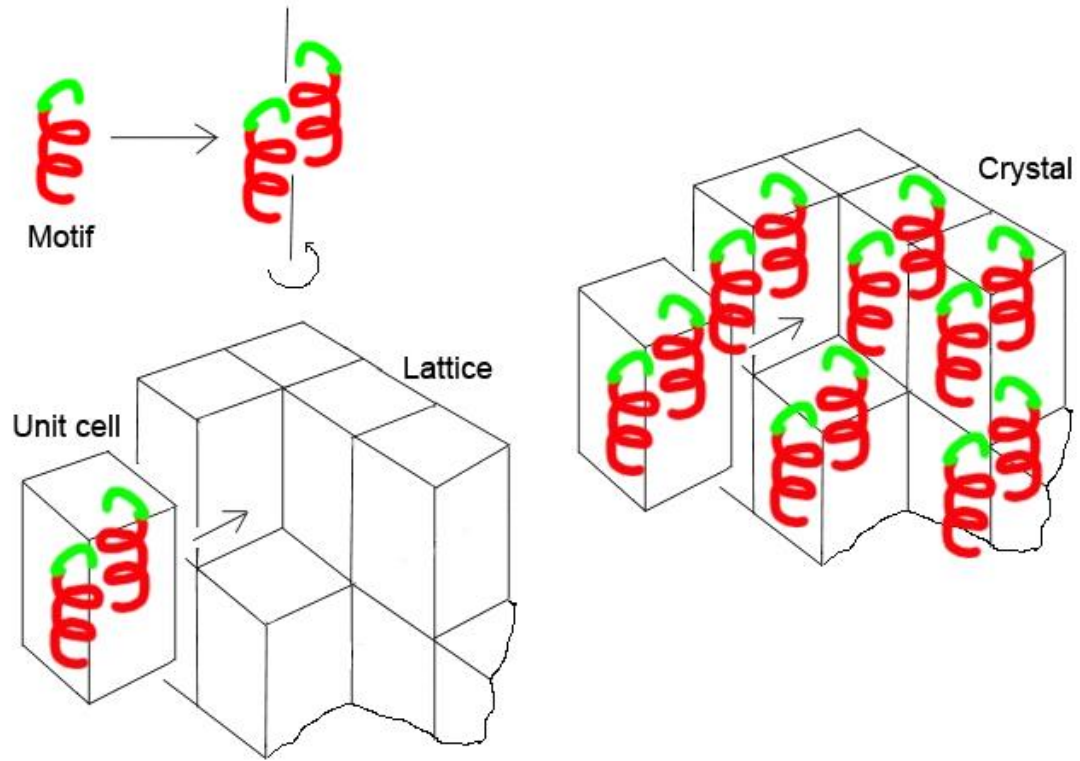
[ 41 2 2 ] #98





- Δεν είναι απαραίτητο να υπάρχει μόνο ένα μόριο ανά στοιχειώδη κυψελίδα. Αντιθέτως: το πλέον συνηθισμένο είναι να υπάρχουν περισσότερα του ενός πανομοιότυπα μόρια ανά κυψελίδα, τα οποία σχετίζονται μεταξύ τους μέσω της ύπαρξης επιπλέον στοιχείων συμμετρίας.

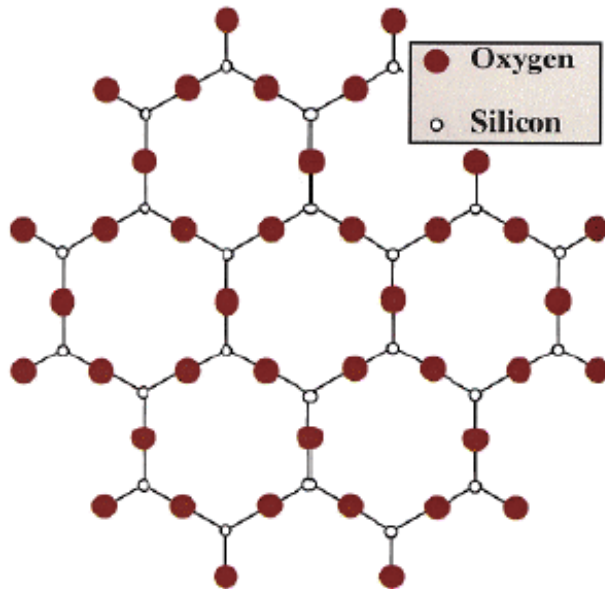




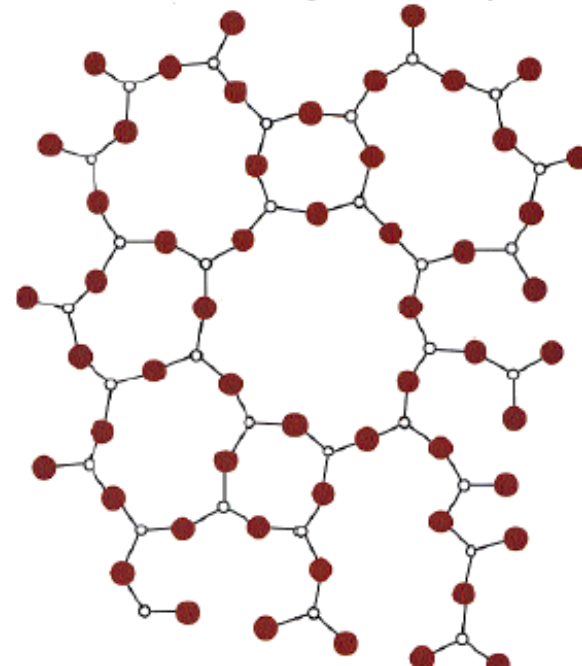
- Εάν η περιοδικότητα εκτείνεται σε όλη την έκταση ενός δείγματος → **Μονοκρύσταλλος**
- Εάν η περιοδικότητα εκτείνεται σε περιοχές της τάξεως των  $10^5$  περιόδων (δηλ. της τάξεως mm) → **Πολυκρυσταλλικό δείγμα**
- Εάν η περιοδικότητα εκτείνεται σε περιοχή συγκρίσιμη με την περίοδο (συνήθως της τάξεως μερικών Å) → **υαλώδες ή άμορφο υλικό**

## Crystalline vs. Amorphous of $\text{SiO}_2$

**Quartz:** (Crystalline)  
Both Short and Long Range Order



**Glass:** (Amorphous)  
Short Range Order Only

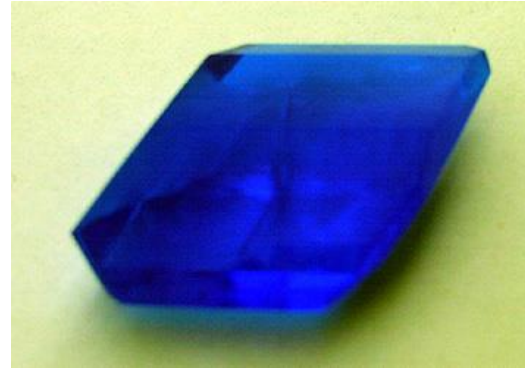


# Που βρίσκονται οι κρύσταλλοι;

Όλοι ξέρουμε τους πολύτιμους λίθους. Ίσως κρυστάλλους διαφόρων ανοργάνων ουσιών [αλάτι ( $\text{NaCl}$ ), γαλαζόπετρα ( $\text{CuSO}_4$ ) ή οργανικών π.χ. ζάχαρης.



Σπηλιά με γιγαντιαίους κρυστάλλους χαλαζία στο Μεξικό



Κρύσταλλος γαλαζόπετρας



Πολύτιμοι λίθοι



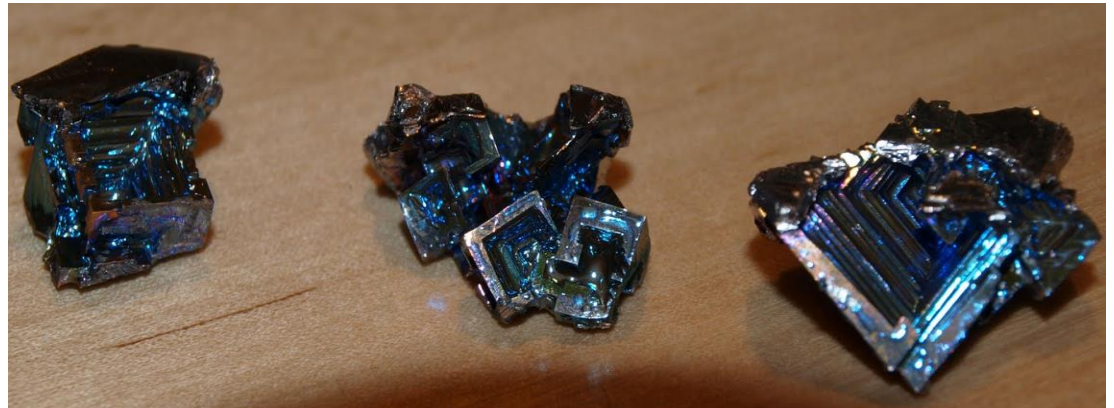
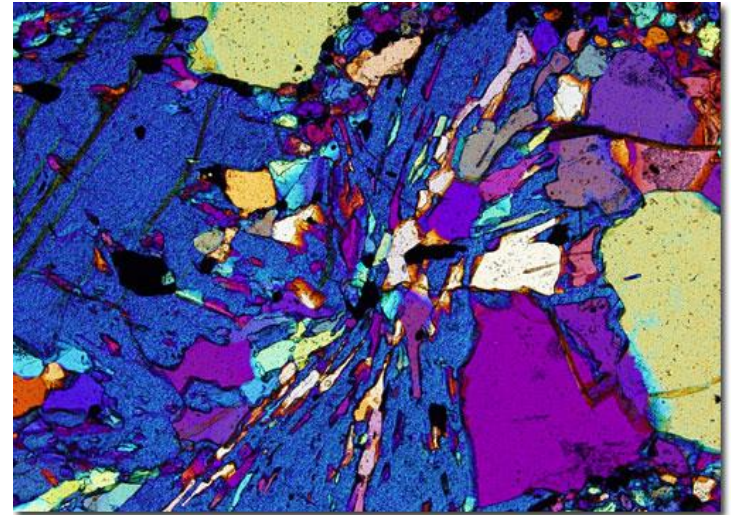
Οι κρύσταλλοι είναι όμως πολύ περισσότερο διαδεδομένοι στην φύση από όσο νομίζουμε:

- Ο πάγος (π.χ **χιονοφιγάδα**) είναι επίσης κρύσταλλος
- Τα περισσότερα **ορυκτά και πετρώματα (π.χ άμμος)** είναι πολυκρυσταλλικά δηλαδή αποτελούνται από μικρούς κρυστάλλους κολλημένους μεταξύ τους
- Τα **μέταλλα** και διάφορα άλλα υλικά όπως οι ημιαγωγοί



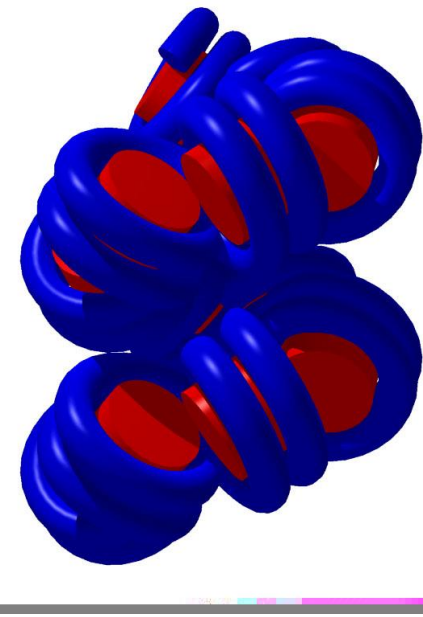
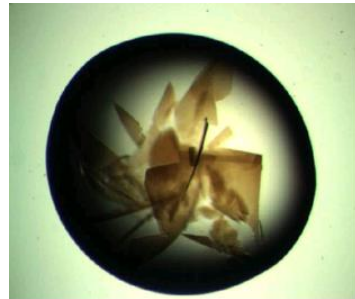
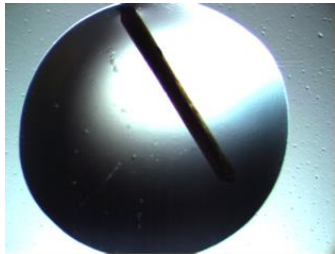
Χιονοφιγάδα

Χαλαζίας



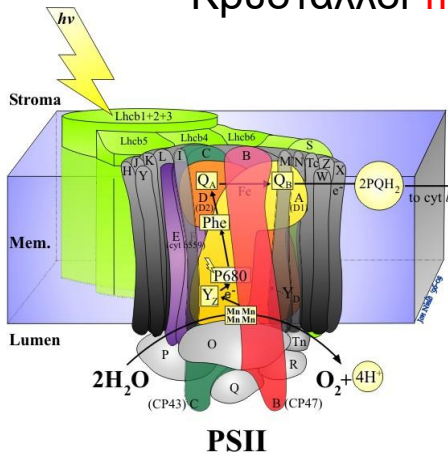
Βισμούθιο

Αλλά και πολύ μεγάλες ενώσεις κρυσταλλώνονται, όπως οι **πρωτεΐνες**, οι ιοί και άλλα μεγάλα σωματίδια όπως το **νουκλεόσωμα** και το **ριβόσωμα**.

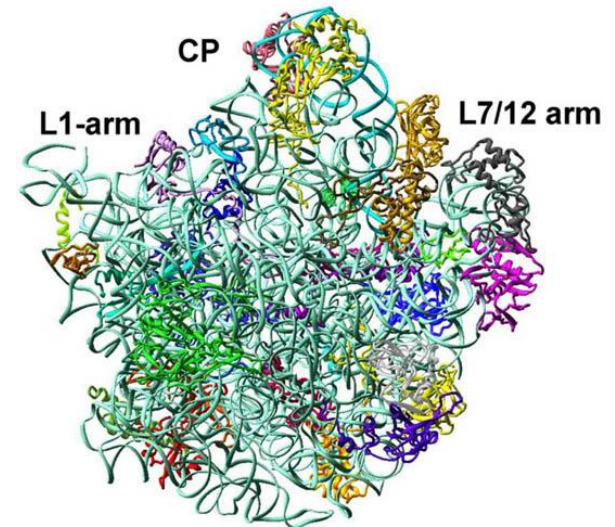
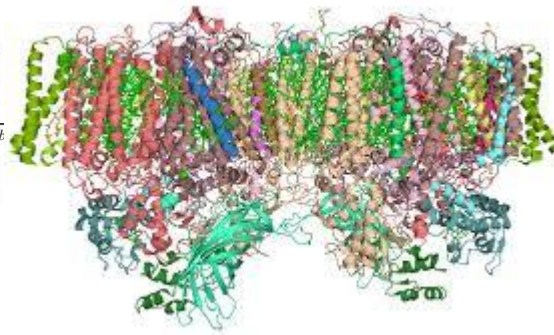


Δομή του **νουκλεοσώματος**  
(μια ματιά για το πώς πακετάρεται το DNA)

Κρύσταλλοι **πρωτεΐνων**



Φωτοσύστημα II



Ριβόσωμα

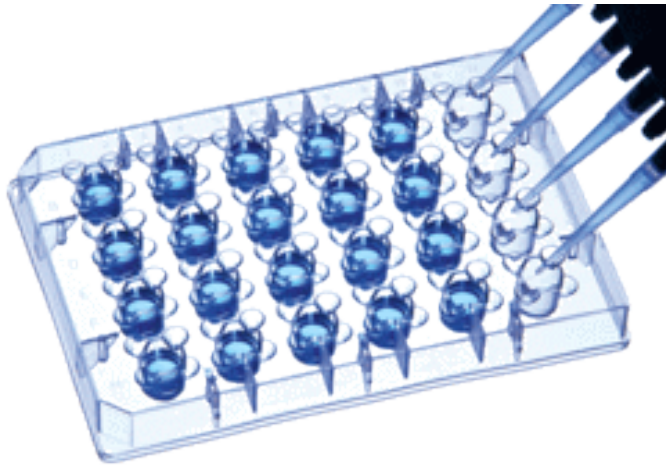


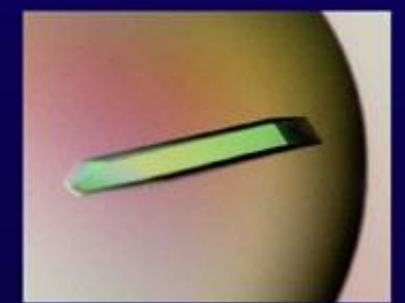
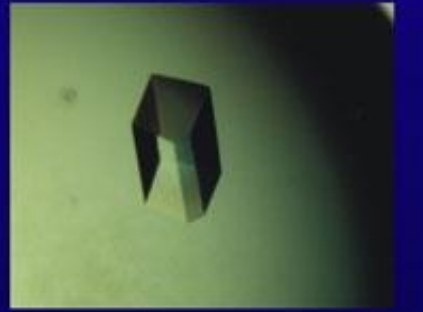
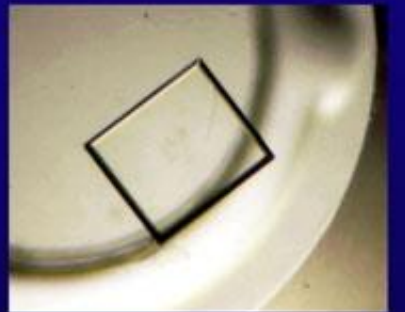
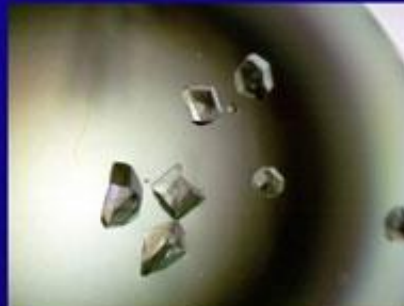
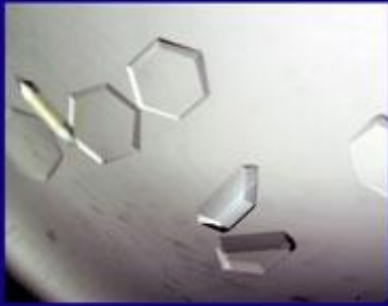
# Πως δημιουργούνται οι κρύσταλλοι;

Όταν ένα υγρό μετατρέπεται σε στερεό και οι συνθήκες το επιτρέπουν

Όταν μια ουσία σε ένα κορεσμένο διάλυμα καθιζάνει και οι συνθήκες το επιτρέπουν

Δημιουργούνται στην φύση από φυσικές διεργασίες ή στο εργαστήριο, τεχνητά

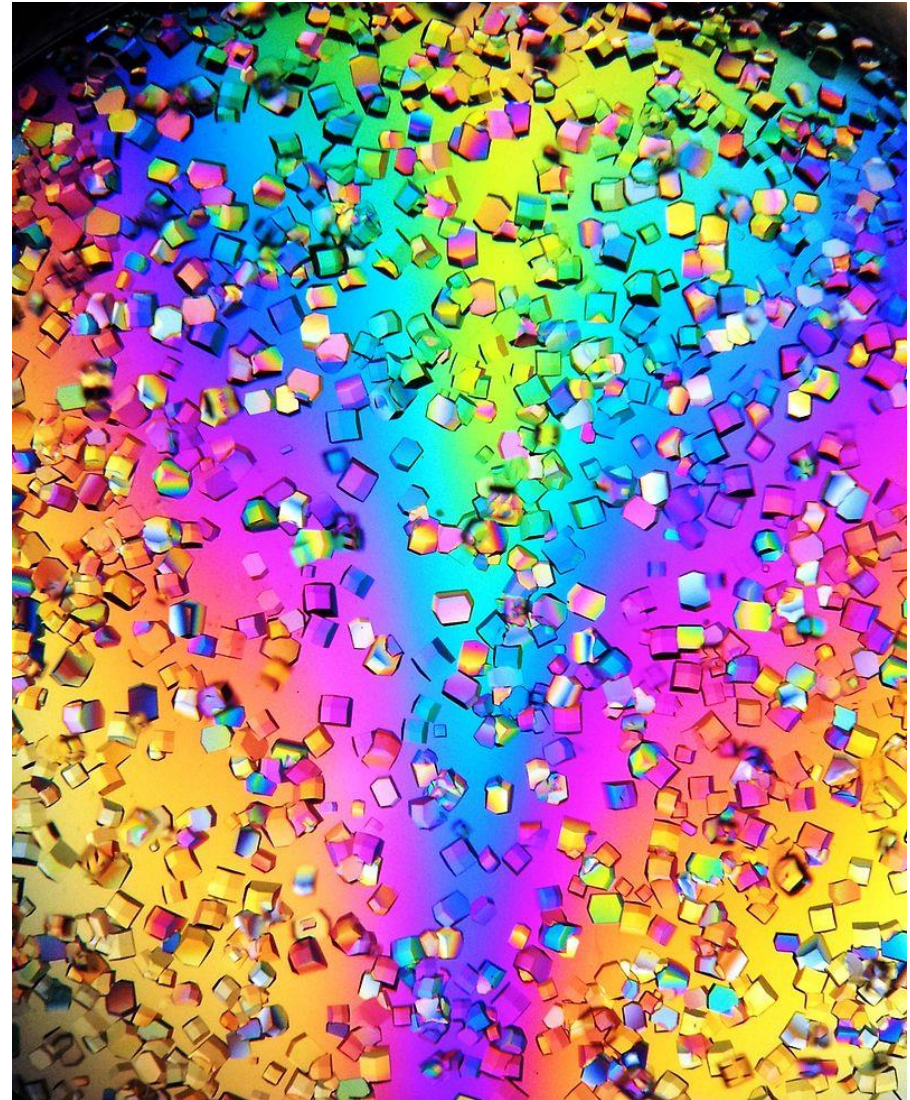








Crystals of proteins grown on the U.S. Space Shuttle or Russian Space Station, Mir.



Lysozyme crystals observed through polarizing filter.

# Προβλήματα (συνέχεια)

- Πως θα απομονώσουμε ένα μόνο μόριο και πως θα το σταθεροποιήσουμε σε μια καλά καθορισμένη θέση ;

Εάν αντί ενός μορίου έχουμε πολλά επαναλαμβανόμενα αντίγραφα του ίδιου μορίου όλα με τον ίδιο προσανατολισμό (δηλ. έναν κρύσταλλο) τότε

1. δεν απαιτείται πλέον να απομονώσουμε ένα μόνο μόριο, και,

2. μπορούμε να σταθεροποιήσουμε με μεγάλη ακρίβεια αυτήν την συνάθροιση γιατί πρόκειται πλέον για ένα μακροσκοπικό αντικείμενο (συνήθως ορατό με γυμνό μάτι).

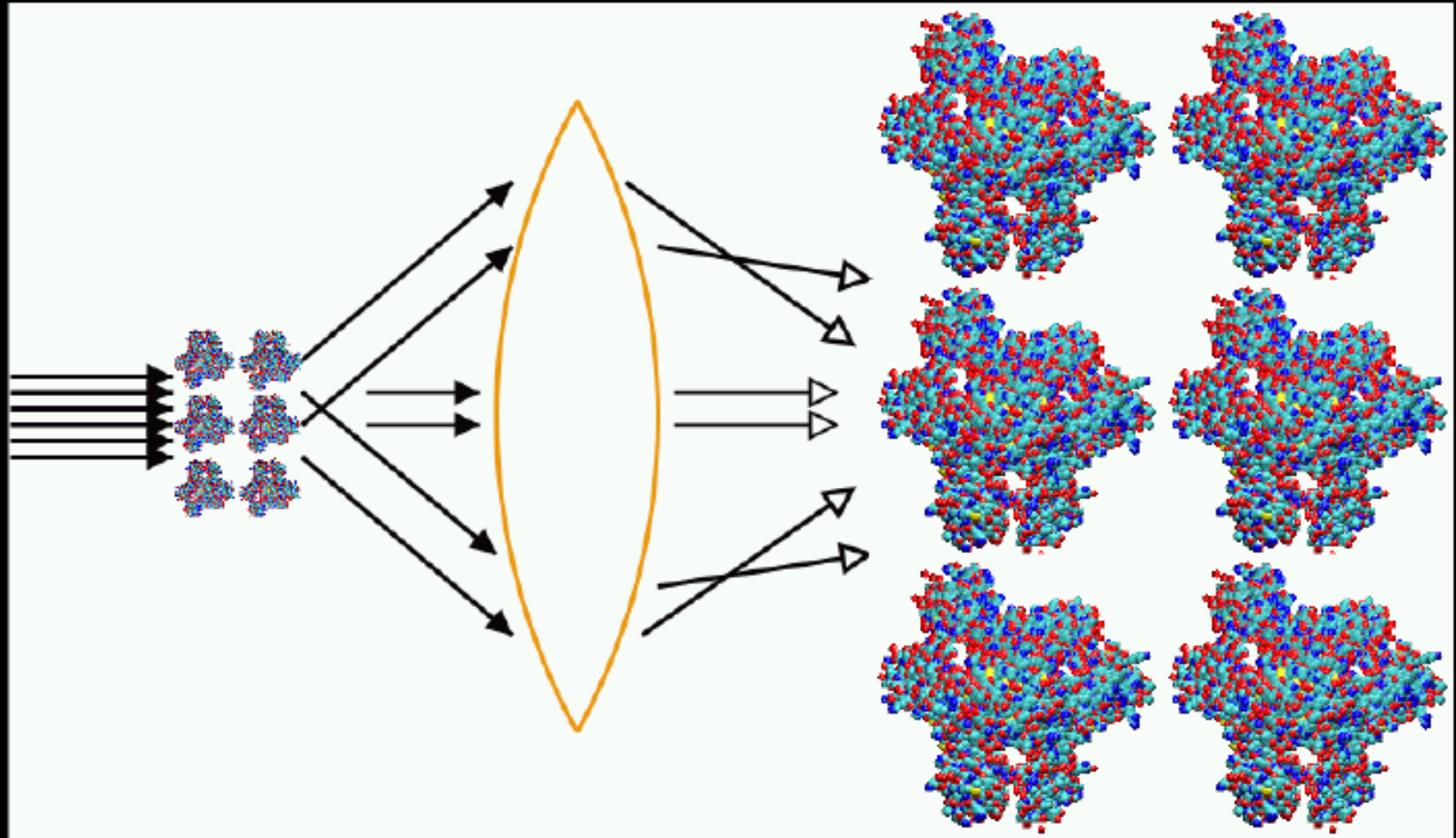
# Προβλήματα (συνέχεια)

- Πως θα μπορέσουμε να περιστρέψουμε το μόριο κατά βούληση ώστε να είμαστε σε θέση (από τις διαφορετικές προβολές) να συμπεράνουμε τη δομή του στον τρισδιάστατο χώρο ;

Εάν αντί ενός μορίου έχουμε πολλά επαναλαμβανόμενα αντίγραφα του ιδίου μορίου όλα με τον ίδιο προσανατολισμό (δηλ. έναν κρύσταλλο) τότε μπορούμε να περιστρέψουμε με μεγάλη ακρίβεια αυτήν την συνάθροιση γιατί πρόκειται πλέον για ένα μακροσκοπικό αντικείμενο (συνήθως ορατό με γυμνό μάτι).



# Το ιδεατό πείραμα (2)





# Με ένα σμπάρο, τρία τρυγόνια

- Θα είναι αρκετά ισχυρό το σήμα από ένα μόνο μόριο ώστε να μπορέσουμε να το "δούμε" ;

Εάν έχουμε πολλά επαναλαμβανόμενα αντίγραφα του ίδιου μορίου, και εάν υποθέσουμε ότι οι μεταξύ τους διαφορές οφείλονται σε τυχαίο θόρυβο, τότε μπορούμε να βελτιώσουμε την ποιότητα του ειδώλου του μορίου με το να κάνουμε averaging (να υπολογίσουμε το "μέσο είδωλο"). Η αναμενόμενη βελτίωση του λόγου σήμα/θόρυβος είναι ίση με την τετραγωνική ρίζα του  $N$ , όπου  $N$  είναι ο αριθμός των αντιγράφων του μορίου.

# Με ένα σμπάρο, τρία τρυγόνια, αλλά δε φτάνουν ...

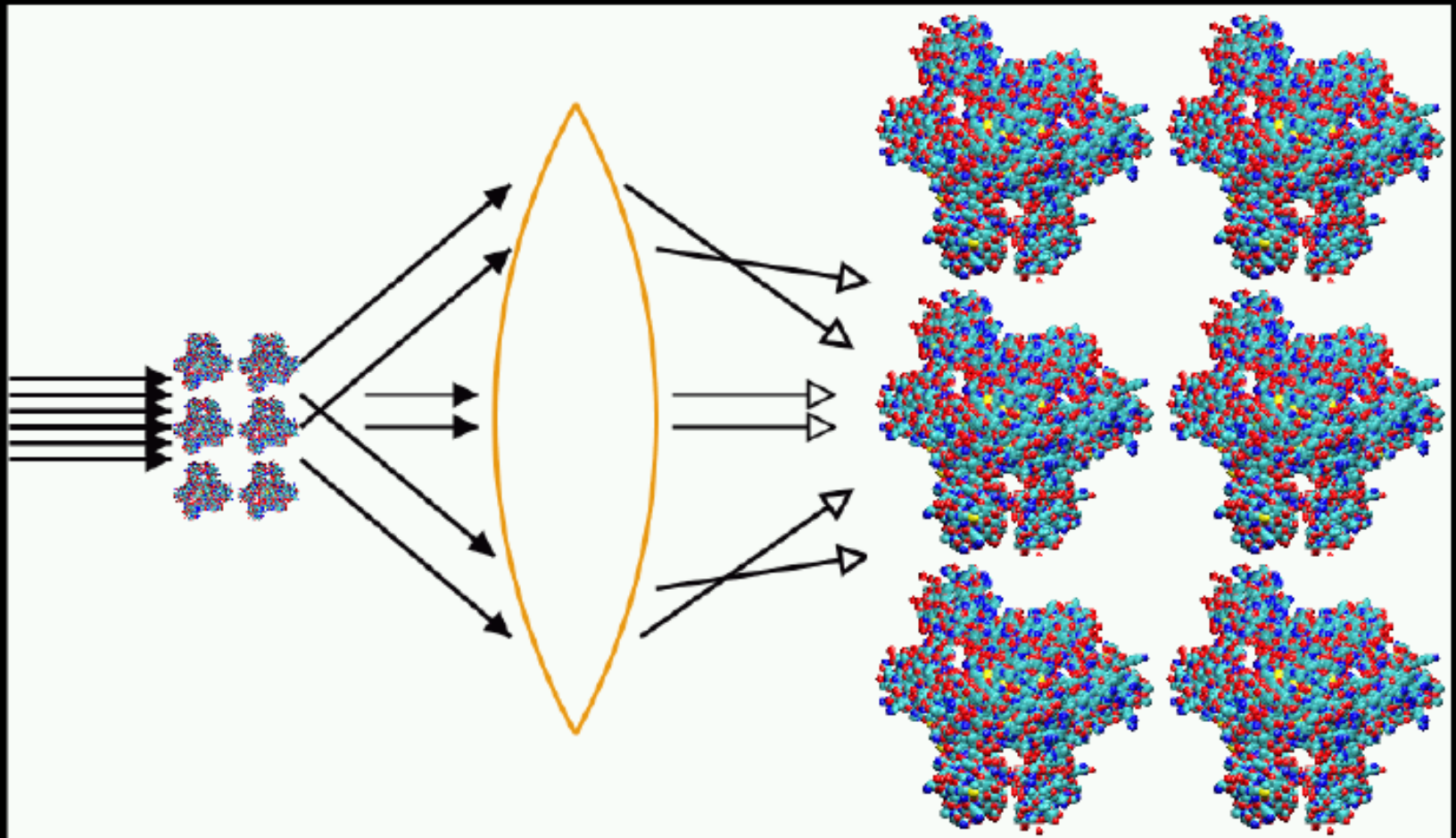
- Τι φακούς θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε ;

Δεν θα χρησιμοποιήσουμε.

Δεν υπάρχει υλικό το οποίο να έχει συντελεστή διάθλασης για τις ακτίνες  $X$  (ή τα θερμικά νετρόνια) τέτοιο ώστε να μπορεί να κατασκευαστεί ένας πρακτικά υλοποιήσιμος φακός ακτίνων  $X$  που να επιτρέπει υψηλή διακριτικότητα.

# Άρα, την πατήσαμε ;

Όχι ακόμα. Στο ιδεατό πείραμα [αριθμός 2] ...



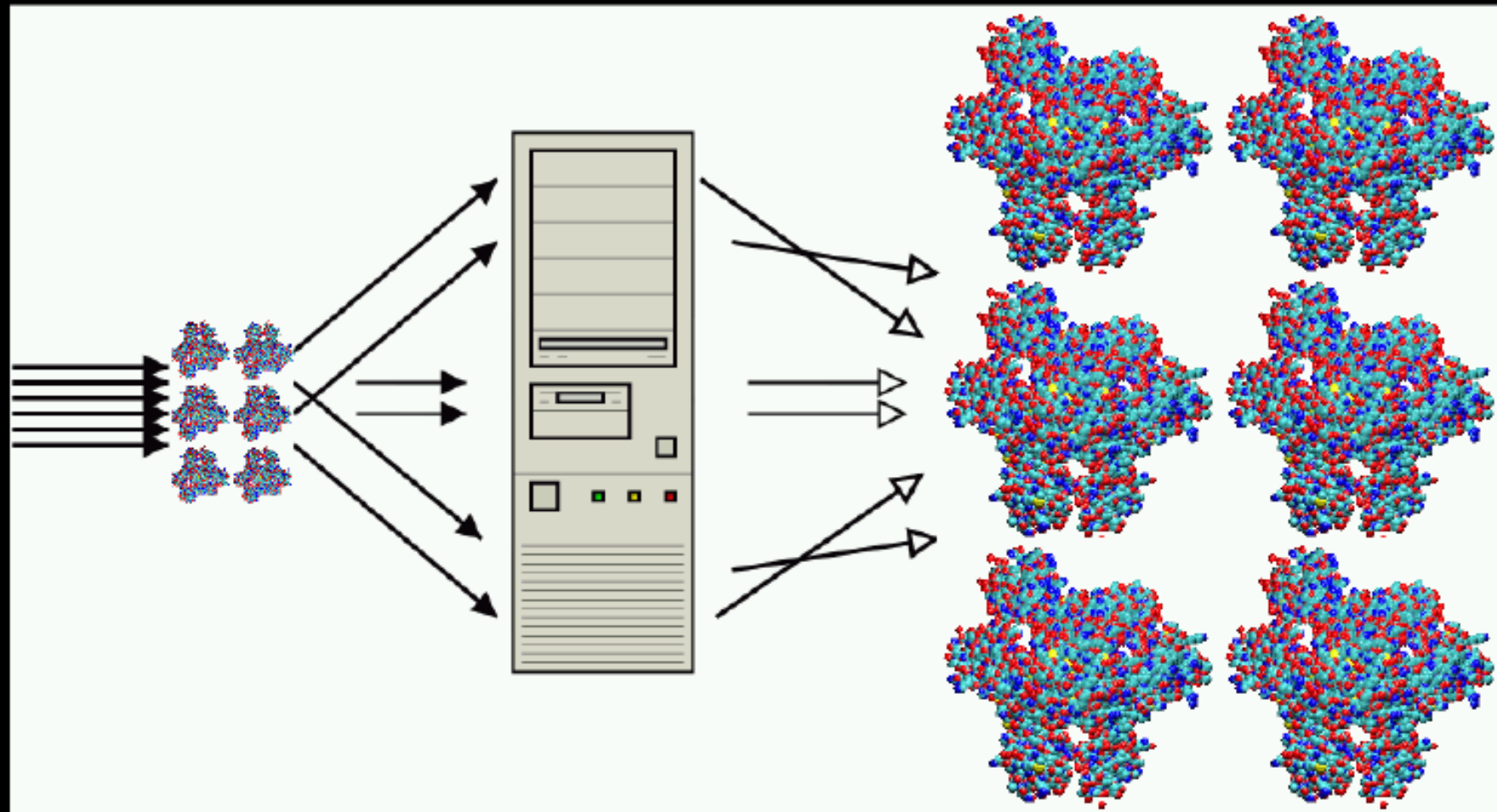
# Άρα, την πατήσαμε ;

... το μόνο που κάνει ο φακός (και όπως θα έπρεπε να κάνουν όλοι οι φακοί) είναι να αλλάζει με τρόπο προβλέσιμο την διεύθυνση διάδοσης των κυμάτων που σκεδάστηκαν από το αντικείμενο (τον κρύσταλλο) εστιάζοντας αυτές τις ακτίνες. Άρα, η δράση του φακού είναι αναλυτικά (αλγεβρικά) προσομοιώσιμη,

**δηλαδή,**

εάν μπορούμε να περιγράψουμε με ακρίβεια το τι συμβαίνει πριν από το φακό, τότε μπορούμε να περιγράψουμε με την ίδια ακρίβεια το τι συμβαίνει μετά το φακό, και συνεπώς μπορούμε να ανακτήσουμε (υπολογιστικά) το είδωλο του αντικειμένου

# Το ιδεατό πείραμα (3)





# Το ιδεατό πείραμα (3) ...

---

... το μόνο που απαιτεί είναι να τοποθετήσουμε στη θέση του φακού έναν ανιχνευτή που θα μας επιτρέψει να προσδιορίσουμε το πλάτος, την φάση, και τη διεύθυνση διάδοσης των κυμάτων που σκεδάζονται από το αντικείμενο. Γνωρίζοντας αυτά, μπορούμε να υπολογίσουμε το είδωλο του αντικειμένου.

**Μόνο που αυτό δε γίνεται ...**

# Πάλι ;

Το τελευταίο πρόβλημα :

Για τους λόγους που αναφέραμε, το μήκος κύματος που απαιτείται είναι  $\sim 1\text{\AA}$ . Η συχνότητα ενός κύματος διαδιδόμενου με την ταχύτητα του φωτός και με μήκος κύματος  $1\text{\AA}$  είναι :

$$\begin{aligned} \nu &= c / \lambda = 300.000.000 / 1 \cdot 10^{-10} = \\ &= 3 \cdot 10^{18} \text{ sec}^{-1} \end{aligned}$$

δηλαδή το κύμα αλλάζει φάση 3 πεντάκις εκατομμύρια (τρία δισεκατομμύρια δισεκατομμυρίων) φορές το δευτερόλεπτο.

Δυστυχώς, είναι αδύνατο να προσδιοριστεί η φάση ενός κύματος με τόση υψηλή συχνότητα.



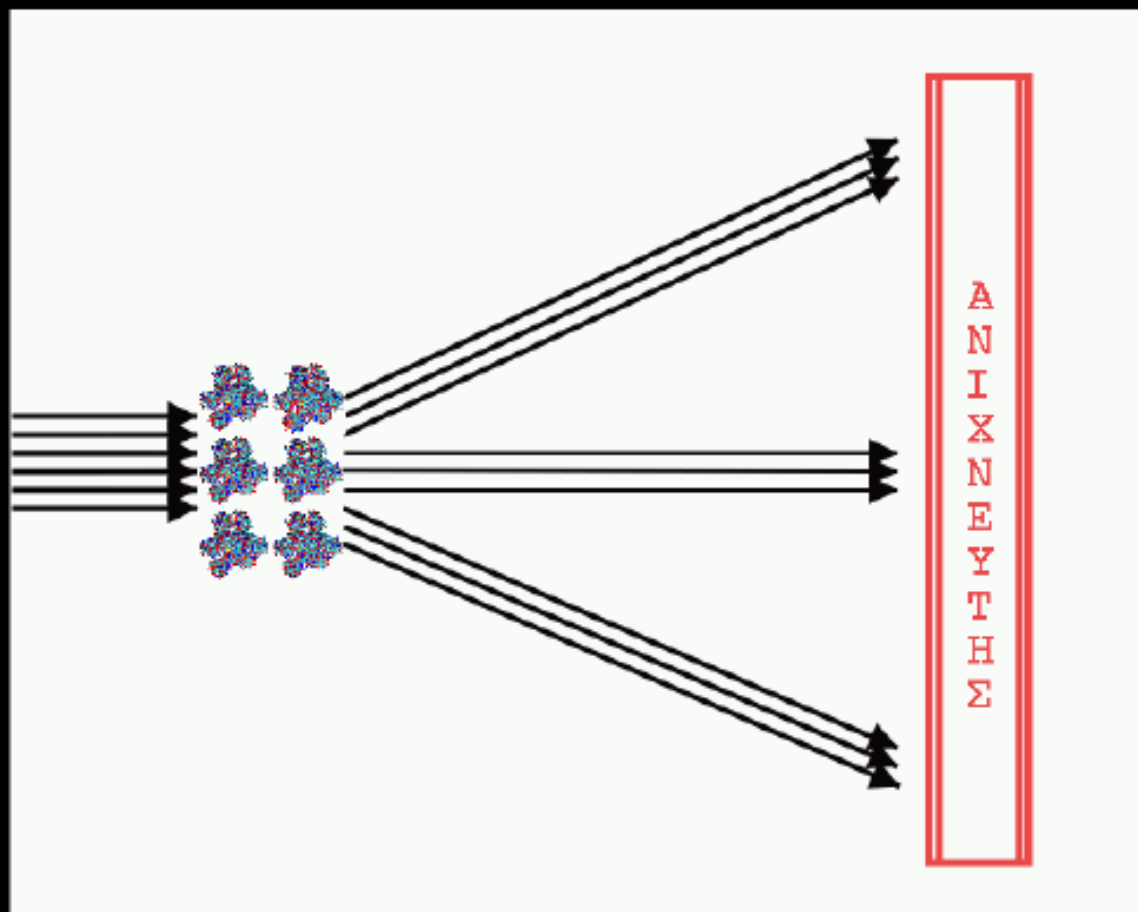
# Άρα, την πατήσαμε ;

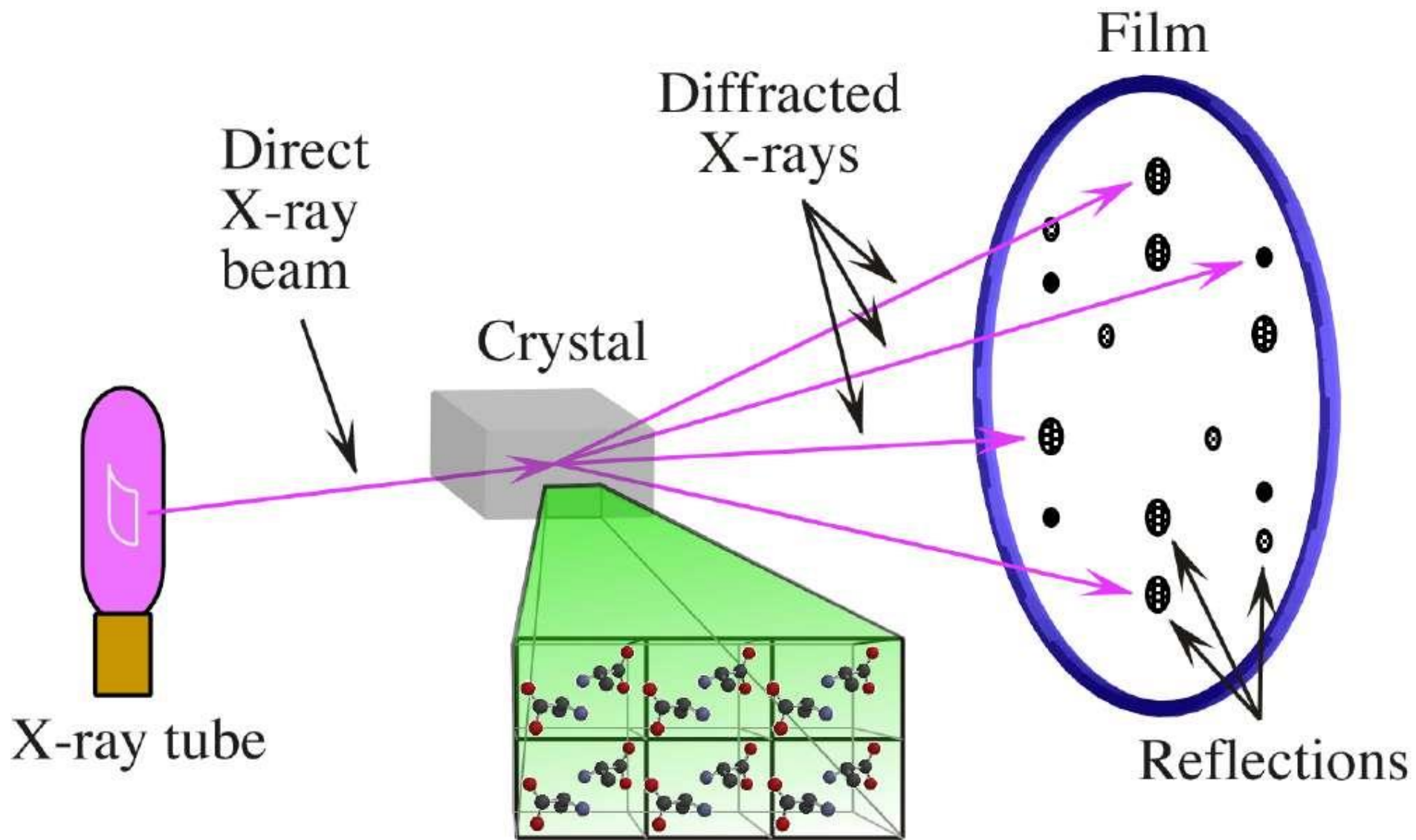
Μάλιστα. Και τόσο άσχημα, που έχει όνομα. Είναι το "πρόβλημα φάσεων" της κρυσταλλογραφίας.

Αυτό έγκειται στο ότι ενώ το πλάτος και η διεύθυνση των σκεδαζόμενων (περιθλώμενων) από τον κρύσταλλο κυμάτων μπορεί να προσδιοριστεί πειραματικά, η φάση (ή έστω η σχετική φάση) αυτών των κυμάτων δεν μπορεί να προσδιοριστεί άμεσα.

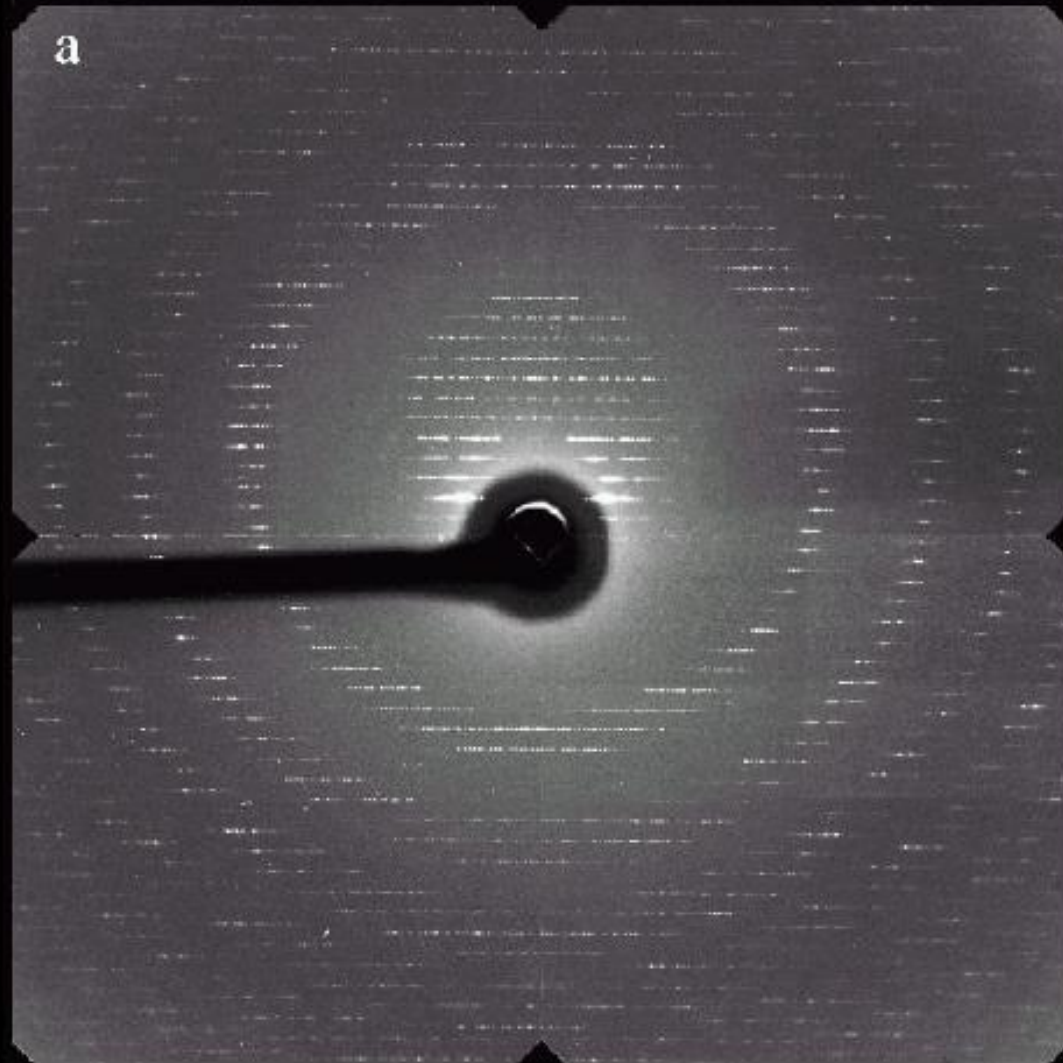
Οι έμμεσοι τρόποι προσδιορισμού αυτών των φάσεων συνιστούν τον πυρήνα της κρυσταλλογραφίας και -μαζί με τη δημιουργία κρυστάλλων- είναι τα περιοριστικά βήματα της διαδικασίας προσδιορισμού δομών μέσω κρυσταλλογραφίας ακτίνων Χ.

# Το υλοποιήσιμο πείραμα

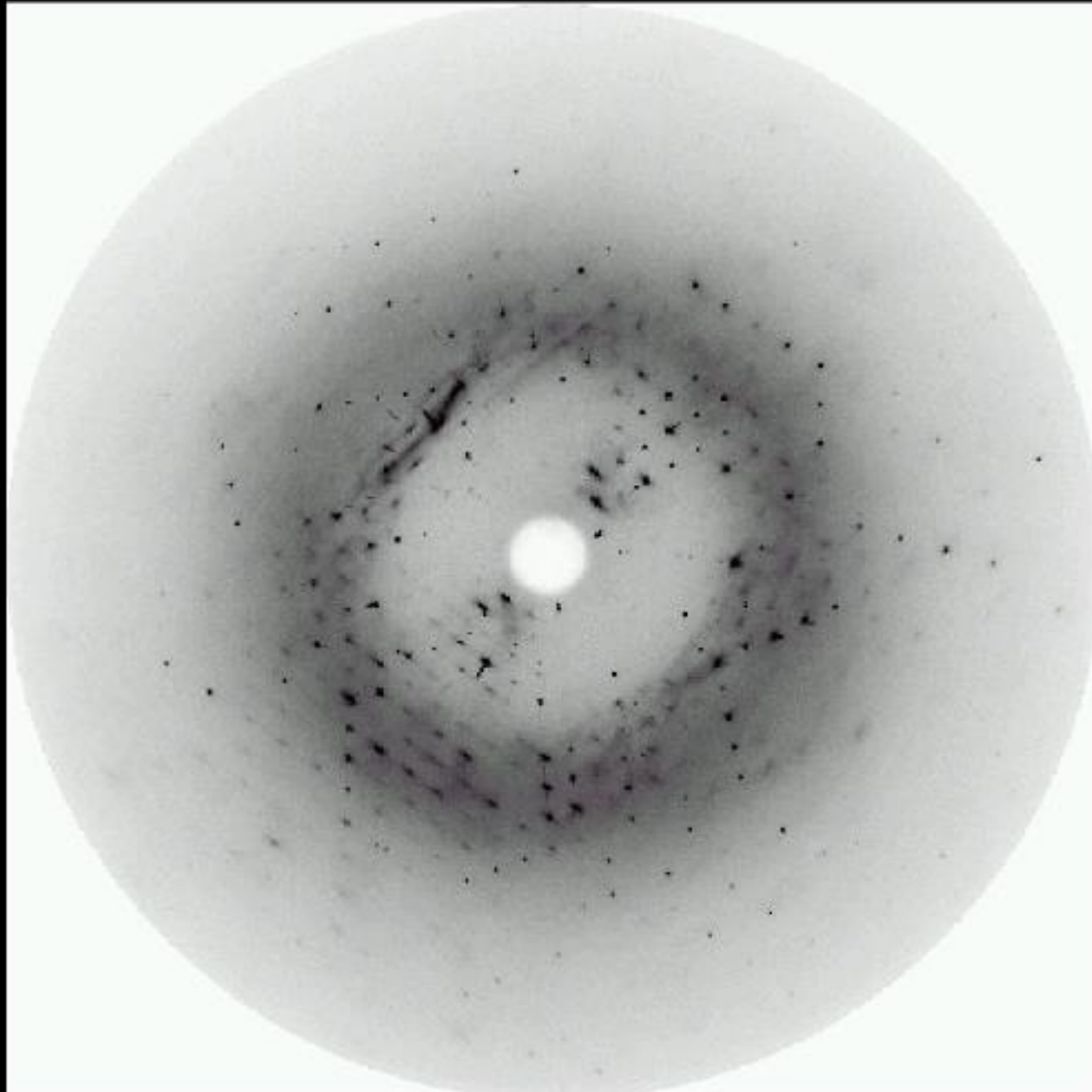




# Εικόνες περίθλασης



# Εικόνες περίθλασης

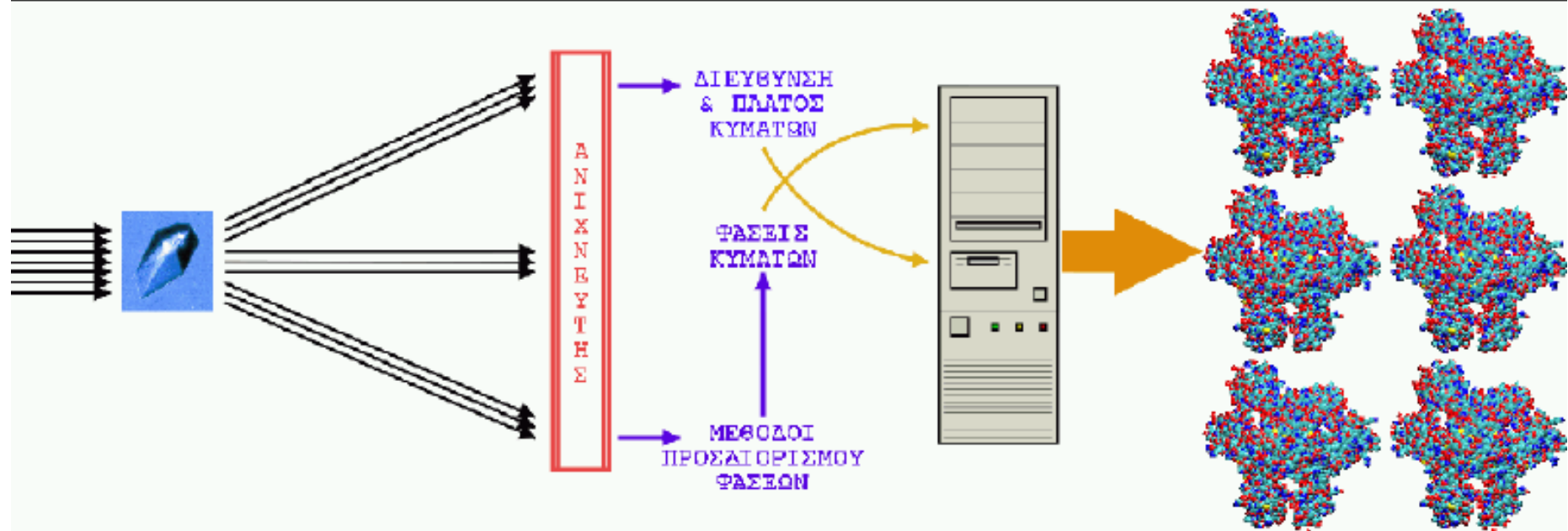




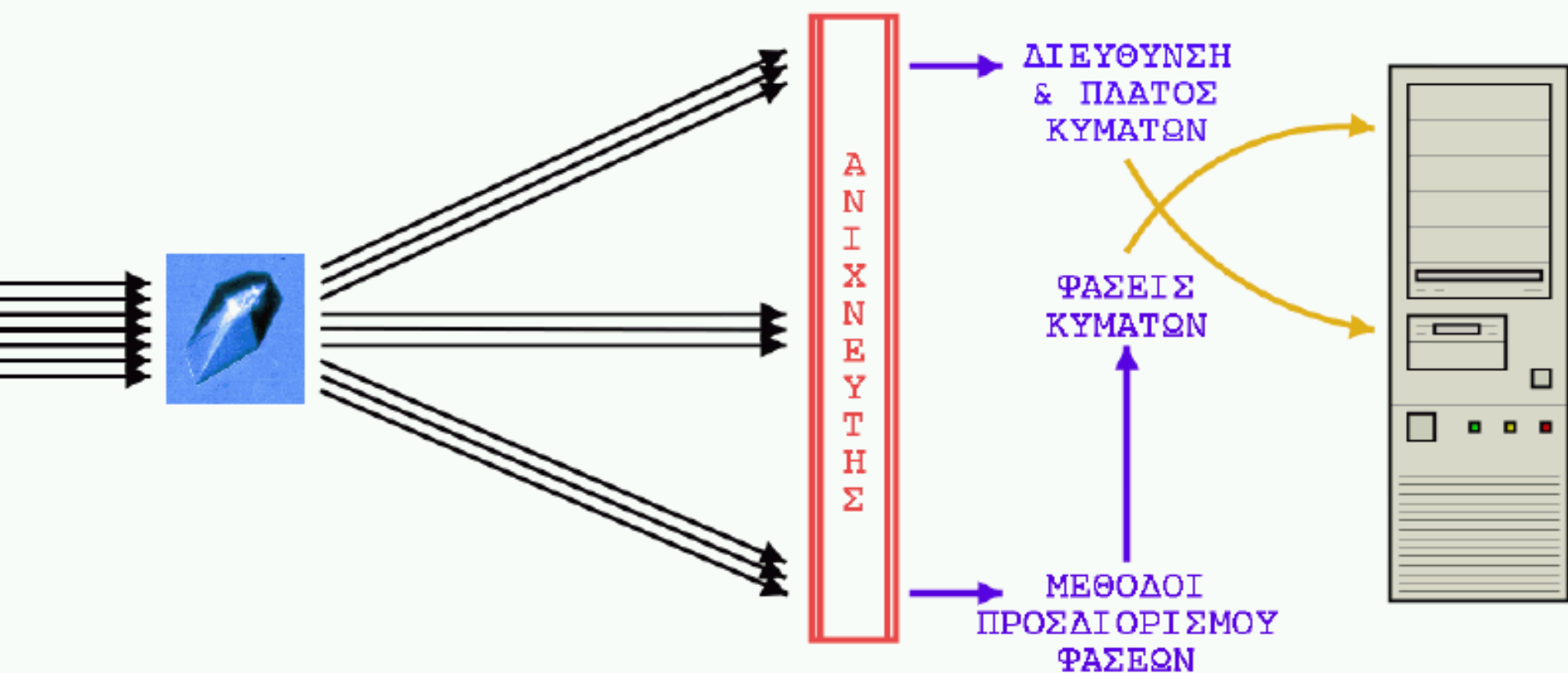
# Εικόνες περίθλασης

- Από τη θέση πρόσπτωσης των περιθλώμενων κυμάτων στον ανιχνευτή και τη γνωστή σχετική θέση κρυστάλλου-ανιχνευτή προσδιορίζεται η διεύθυνση διάδοσης των κυμάτων.
- Από την ένταση ("λαμπρότητα") των κυμάτων, προσδιορίζεται το πλάτος τους.
- Εάν (με τη βοήθεια των διαφόρων μεθόδων προσδιορισμού φάσεων) γνωρίζουμε και τις φάσεις τους, μπορούμε να υπολογίσουμε το είδωλο του κρυστάλλου και συνεπώς, τη δομή του μορίου.

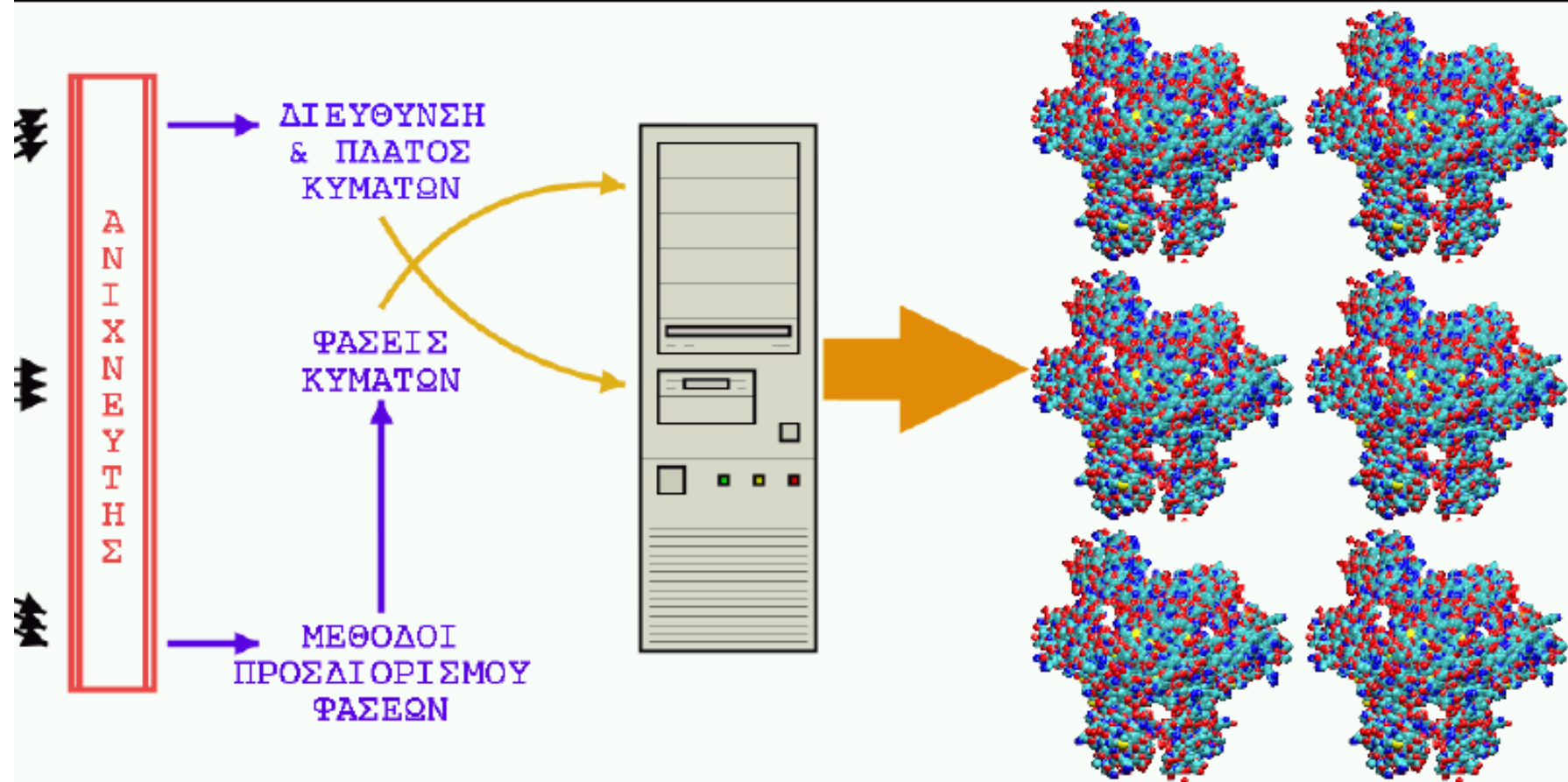
# Το κρυσταλλογραφικό πείραμα



# Το κρυσταλλογραφικό πείραμα



# Το κρυσταλλογραφικό πείραμα



# Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ

## 1. Παραγωγή ακτίνων-Χ

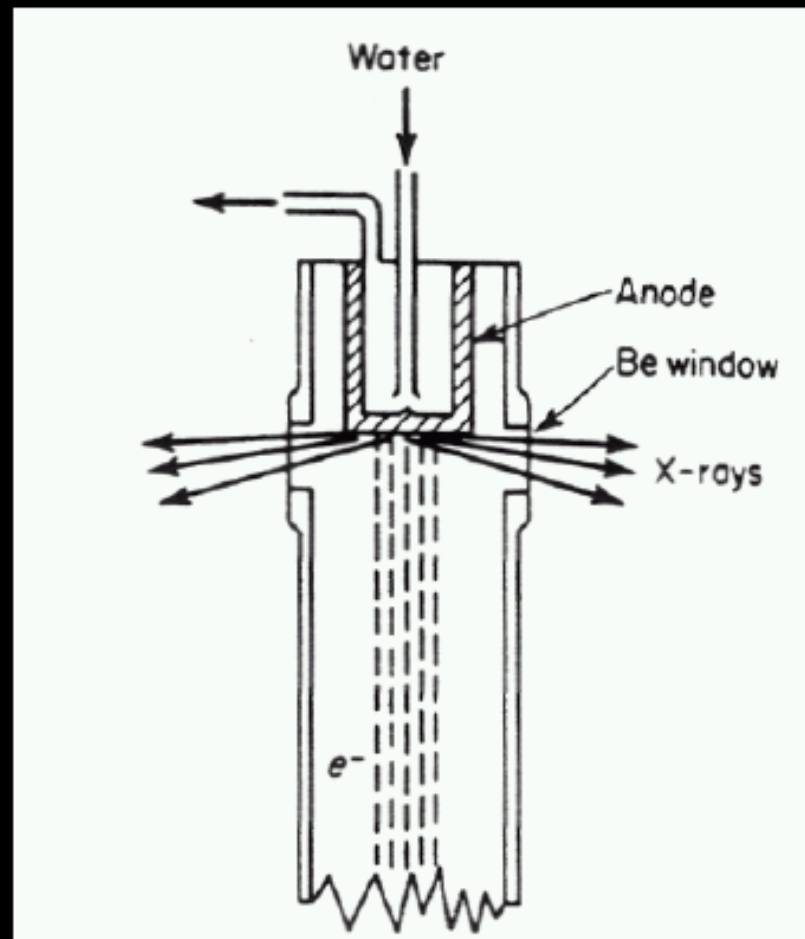
Το ζητούμενο είναι μια όσο το δυνατό ισχυρή, παράλληλη, μονοχρωματική και ομοιογενής δέσμη ακτίνων-Χ.

Οι εργαστηριακές πηγές ακτίνων-Χ χρησιμοποιούν την ακτινοβολία που παράγεται όταν ηλεκτρόνια κατάλληλης ενέργειας προσκρούουν σε ένα στόχο (μέταλλο κατάλληλου ατομικού αριθμού, συνηθέστατα χαλκός ή μολυβδαίνιο).



# Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ

## 1. Παραγωγή ακτίνων-Χ



# Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ

## 1. Παραγωγή ακτίνων-Χ

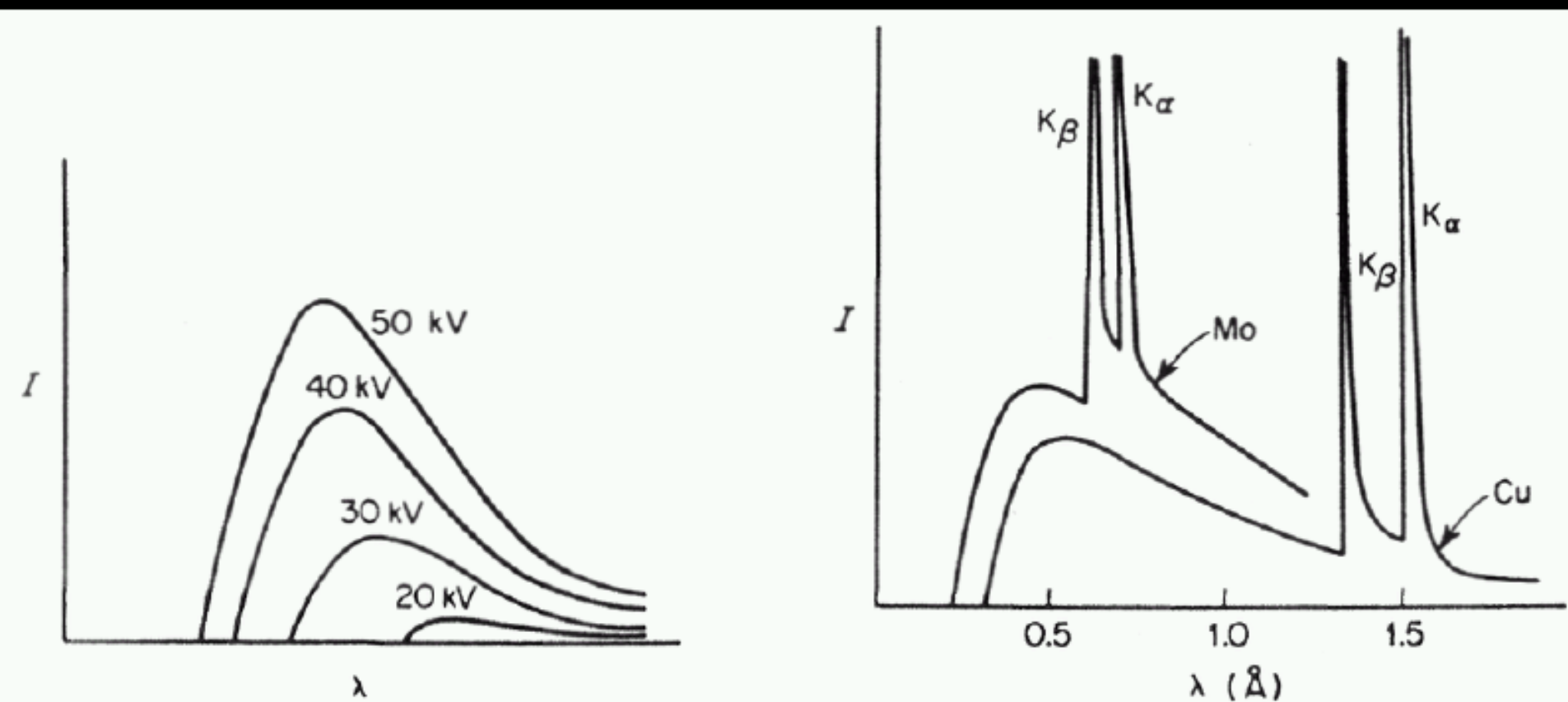
Η αποτάχυνση των ηλεκτρονίων λόγω των τυχαίων συγκρούσεων τους με τα άτομα του στόχου δημιουργεί ένα συνεχές πολυχρωματικό φάσμα (white radiation).

Όταν η ενέργεια των ηλεκτρονίων είναι κατάλληλη, προκαλούνται μεταπτώσεις ηλεκτρονίων εσωτερικών στοιβάδων του μετάλλου-στόχου (π.χ.  $K \Rightarrow L$ ).

Η αποδιέγερση αυτών των ατόμων (π.χ.  $L \Rightarrow K$ ), γίνεται με εκπομπή μονοχρωματικής ακτινοβολίας η συχνότητα (και συνεπώς, μήκος κύματος) της οποίας εξαρτάται από την ενεργειακή διαφορά μεταξύ των στοιβάδων και είναι χαρακτηριστική των ατόμων του στόχου (φασματικές γραμμές).

# Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ

## 1. Παραγωγή ακτίνων-Χ



# Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ

## 1. Παραγωγή ακτίνων-Χ

Το συνεχές πολυχρωματικό φάσμα (λόγω της μη μονοχρωματικότητας του) δεν είναι κατάλληλο για εργαστηριακά κρυσταλλογραφικά πειράματα και αφαιρείται μέσω της χρήσης φίλτρων, κρυστάλλων μονοχρωματισμού, ...

Οι χαρακτηριστικές φασματικές γραμμές είναι αυτές που χρησιμοποιούνται στα πειράματα.

# Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ

## 2. Αλληλεπίδραση ύλης/ακτίνων-Χ

Η ηλεκτρική συνιστώσα του ηλεκτρομαγνητικού κύματος δημιουργεί ένα μεταβαλλόμενο ηλεκτρικό πεδίο. Επειδή η συχνότητα των ακτίνων-Χ είναι τόσο υψηλή, τα ηλεκτρόνια των ατόμων μπορούν σε καλή προσέγγιση να θεωρηθούν ελεύθερα σε αυτό το πεδίο και να θεωρηθεί συνεπώς ότι εκτελούν εξαναγκασμένη ταλάντωση με συχνότητα ίση με αυτή της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Λόγω αυτής της εξαναγκασμένης ταλάντωσης εκπέμπουν δευτερογενώς ακτινοβολία ιδίου μήκους κύματος με την προσπίπτουσα.



## Σκέδαση από ελεύθερο ηλεκτρόνιο - Σκέδαση Thomson

$$I_{2\theta} = I_0 \frac{e^4}{m^2 r^2 c^4} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$$

Όπου:  $e$  και  $m$ , φορτίο και μάζα ηλεκτρονίου,  $c$  ταχύτητα φωτός

$I_0$  ένταση μη πολωμένης προσπίπτουσας δέσμης

$I_{2\theta}$  ένταση σκεδαζόμενης ακτινοβολίας στη διεύθυνση  $2\theta$  ανά μονάδα στερεάς γωνίας

$$P = (1 + \cos^2 2\theta) / 2$$

Παράγοντας πόλωσης

✗ Νετρόνια

✗ Πρωτόνια  $(e/m)^2$   $1837^2$  μικρότερος των ηλεκτρονίων

**Σύμφωνη** σκεδαζόμενη ακτινοβολία

$$\frac{I}{I_{eTh}} = f^2$$

**f** → Παράγοντας Σκέδασης

## Σκέδαση από άτομα

$\psi_1(\mathbf{r}), \dots, \psi_Z(\mathbf{r})$ : κυματοσυναρτήσεις  $Z$  ατομικών ηλεκτρονίων  
 $\rho_{ej} d\nu = |\psi_j(\mathbf{r})|^2 d\nu$  : πιθανότητα να βρίσκεται το  $j$  ηλεκτρόνιο στον όγκο  $d\nu$

Αν κάθε συνάρτηση  $\psi_j(\mathbf{r})$  θεωρείται ανεξάρτητη από τις άλλες τότε:

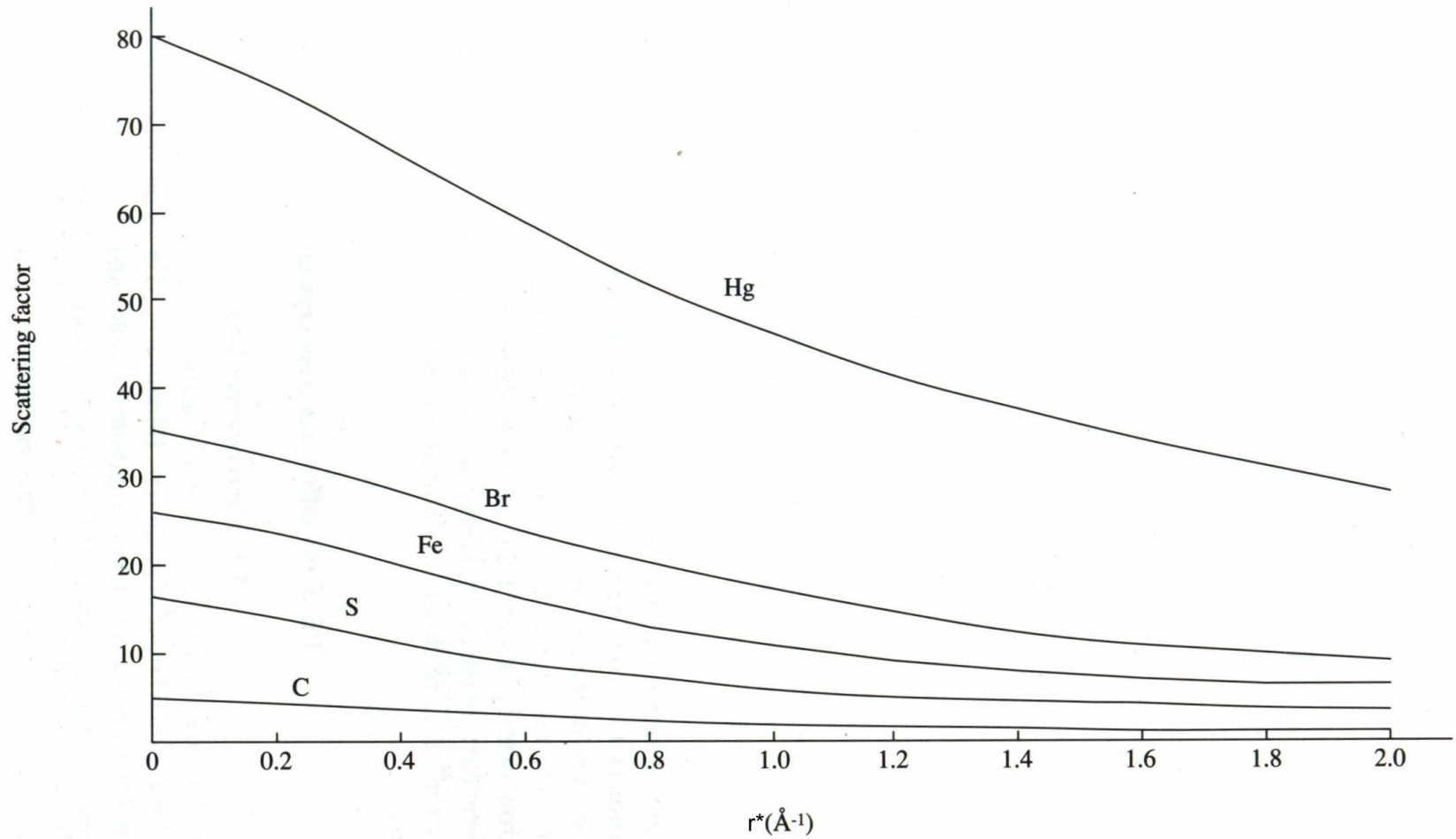
$$\rho_a(\mathbf{r}) d\nu = \left( \sum_{j=1}^Z \rho_{ej} \right) d\nu \quad \text{Πιθανότητα ένα } e^- \text{ να βρίσκεται στον όγκο } d\nu$$

## Ατομικός παράγοντας Σκέδασης

Υπόθεση σφαιρικής συμμετρίας

$$f_a(\mathbf{H}) = \sum_{j=1}^Z f_{ej}$$

# Ατομικοί παράγοντες σκέδασης συναρτήσει του $H = r^*$



# Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ

## 2. Αλληλεπίδραση ύλης/ακτίνων-Χ

Η ολική σκέδαση από το αντικείμενο σε κάποια διεύθυνση είναι το αποτέλεσμα της συμβολής των δευτερογενώς παραγόμενων κυμάτων από κάθε ηλεκτρόνιο του αντικειμένου.

Επειδή οι πυρήνες των ατόμων είναι κατά πολύ βαρύτεροι των ηλεκτρονίων, η συνεισφορά τους στην ολική σκέδαση είναι αμελητέα.

Άρα, η σκέδαση των ακτίνων-Χ από ένα αντικείμενο εξαρτάται μόνο από την κατανομή των ηλεκτρονίων σε αυτό, και μάλιστα από μια συνάρτηση αυτής της κατανομής, τη **συνάρτηση ηλεκτρονικής πυκνότητας  $\rho(x,y,z)$** .

# Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ

## 3. Αλληλεπίδραση κρυστάλλων/ακτίνων-Χ

Το μακροσκοπικό αποτέλεσμα της σκέδασης ακτίνων-Χ από κρυστάλλους ονομάζεται περίθλαση.

Η βασικότερη διαφορά ανάμεσα στην περίθλαση (από κρυστάλλους) και τη σκέδαση (από μη περιοδικά αντικείμενα) είναι ότι τα φάσματα περίθλασης είναι ασυνεχή (έχουν διακριτά μέγιστα) και συμμετρικά (ως συνέπεια της εσωτερικής συμμετρίας των κρυστάλλων).