

عرض النتائج

The presentation of results

(١٥,١) مقدمة Introduction

المرحلة الأخيرة من تحديد التركيب البلوري هي عرضه. يمكن أن يحدث هذا داخل مجموعة البحث الخاص بك، كملصق مؤتمر أو إسهام شفهي، على الإنترنت أو كمقالة محكمة في مجلة. في كل حالة تكون المتطلبات مختلفة ولا بد أن تحيك العرض للوسط المستخدم. كما في كل مهارات الاتصال، فإن تقديم النتائج المرتبطة بالكريستالوجرافيا يتحسن مع التدريب. إن إعلان النتائج التركيبية في مجلات مهتمة بالكريستالوجرافيا أو كيميائية يكون عادة مسيراً بملاحظات Notes ، تعليمات instructions أو إرشاد guidance للمؤلفين المنشورة في هذه المجالات. عدد صغير فقط من المجالات يقبل إسهامات إلكترونية، تلك بواسطة البريد الإلكتروني e-mail من خلال تداخلات الشبكة أو على أقراص ممغنطة، في صورة قابلة للقراءة بواسطة الحاسوب. منذ إبريل 1996 الجزء C من Acta Crystallographica يقبل فقط إسهامات كملفات معلومات بلورية Crystallographic information files (CIFs)، ونفس الشيء صحيح للجزء الجديد E من: Zeitschrift für Kristallographie's مقطع تراكيب بلورية جديدة يقبل تصميمي CIF وCASTOR.

أيضاً بين المجالات المهمة بالكريستالوجرافيا يوجد هناك اتجاه ملحوظ بعيداً عن نشر بيانات أولية (إحداثيات وبارامترات إزاحة). إن انتقاء أكبر في اختيار بارامترات هندسية جزئية لنشرها سيكون أيضاً مشجعاً. بعض المجالات نشرت معلومات تفصيلية لكنها لم تنقل أبداً المعلومة التركيبية بشكل مؤثر والآن أيضاً من الأكثر أهمية أن تتضمن تمثيلات تخطيطية فعّالة للتركيب الخاصة بك. مع انتشار الملخصات التخطيطية في صفحات المحتويات للمجلات، فإن الصورة التي تكون واضحة وجذابة يمكنها أن تكون مؤثرة في جذب اهتمام تصفح القارئ لنسخة ورقية من المجلة أو دليل على WWW.

سوف يتعامل هذا المقطع أولاً مع تخطيطات جزئية، من ثم مع إنتاج جداول وأخيراً مع الطرق المختلفة لتسليم نتائجك. سوف تذكر عملية الحفظ في سجلات أيضاً باختصار. إن استخدام CIF سوف يشار إليه هنا كضرورة، لكن سوف يغطي بتفصيل أكثر في الفصل السادس عشر.

(١٥، ٢) تخطيطات Graphics

رغم أن التخطيطات الجزئية بوضوح أكثر تكون متلازمة مع إنتاج مشاهد بجودة أعلى للتركيب النهائي فإنها أيضاً يمكن أن تستخدم كعامل مساعد في تحديد تركيب ابتدائي، في تفسير خرائط فرق كثافة إلكترونية وأيضاً لفحص خلل وأوضاع أخرى تتطلب نمذجة. نحن نهتم هنا بالأولى من هذه ويكون الاعتبار الأساسي هو جودة الرسم الإيضاحي الناتج في حدود نقاوته، الفاعلية ومحتوى المعلومات الخاصة به. إن برامج الرسم الأولية [مثل 1-2] كانت غير متفاعلة وعلى البرنامج أن يعاد تشغيله في كل مرة يكون مطلوب منظر جديد. لحسن الحظ فإن البرامج الحديثة تكون متفاعلة [مثل 3-5] بدرجة تسمح بدوران متصل أو متدرج للجزء.

(١، ٢، ١٥) برامج تخطيطات Graphics programs

إن مدى برامج التخطيطات كبير وعملياً لا يمكن توفير مسح شامل هنا (أحد مصادر المعلومات عن برامج مفيدة محتملة هو شبكة الموقع لمشروع الحساب التعاوني على Collaborative Computational Project CCP14 على www.ccp14.ac.uk). إن غالبيتها تكون مجانيةً (على الأقل للمستخدمين الأكاديميين) أو تكون تكلفتها زهيدة. إن العامل الرئيس في اختيارك للبرنامج هو نطاق سماته وكيف أن هذه تتوافق مع ما نحتاجه. هل الجسومات الأهليلية لإزاحات ذرية هي المطلوبة؟ هل تمثيلات متعددات الأوجه مهمة؟ هل تريد أن تظهر رسم كرة-عصا لجزء في غلاف إطار فان درفالس له؟ ما هو مدى السهولة في التعامل مع عوامل تماثل لو أن لديك جزئيات في مواضع خاصة أو أنك تريد مخططات تعبئة؟ نقطة أبعد تعني أن بمقدرة البرنامج أن يقرأ ويكتب البيانات في تصميمات معينة. على سبيل المثال لو أنك تريد بانتظام أن تمثل البيانات في ملفات من قاعدة البيانات التركيبية كامبريدج Cambridge Structural Database يكون من المرغوب أن يعمل برنامجك هذا بدون تحرير يدوي للملف المدخل. بصورة أكثر عموماً إن قدرة البرنامج أن يولد ملفات رسم في تصميمات نموذجية مثل HPGL أو ملحقات تجعل من المحتمل أن تدمج هذه داخل مستندات أو نقلهم بواسطة البريد الإلكتروني e-mail أو FTP أو إلى طابعة أو راسم شبكي. إذا لم يكن البرنامج قادراً على أن يصدر الخرج الخاص به في تصميم مفيد، يمكنك الاعتماد على جودة الخرج الخاص به بطابعة أو راسم محلي. لاحظ أن هذه البرامج تكون متاحة والتي تقرأ وتحول تصميمات بيانات مختلفة مثل BABEL وتصميمات تخطيطية مختلفة مثل GHOSTVIEW.

يوجد أيضاً برنامجين متاحين تجارياً زوداً عادة بواسطة مصانع أجهزة قياس الحيود كجزء من تعبئة كاملة للتحليل التركيبي، لكن في بعض الأحيان يمكن شراء هذه منفصلة عن الأجهزة. مثل تلك التعبئة لها ميزة التكامل: على سبيل المثال تكون برامج الحل

والتنقيح متصلة بشكل مباشر مع وحدة برمجيه للتخطيطات، والمشاكل التي قد تنشأ بسبب تصميمات لبيانات غير متوافقة يمكن تجنبها. يكون التكامل متاحاً أيضاً في برامج متاحة مجانية (مثل WinGX [6]، الذي يقدم بيئية تواصل تخطيطي رابطاً لبرامج عامة مطلوبة متنوعة).

إن القوة المتزايدة للحاسوبات المكتبية وتوافر طابعات ليزر رخيصة الثمن بتحليل 6000 dpi أو أعلى قد أوضحت أن نشر الرسوم بجودة عالية يمكن إنتاجه مع ما هو الآن قياسي وقدرة عتاد الحاسوب. لو أنك تدرس شراء نظام لتحليل تركيب، فإن النصيحة هي نفسها لأي مشتريات خاصة بالحاسوب. أولاً: اختر البرنامج software الذي تحتاجه ثم اختر عتاد الحاسوب hardware الذي تعلم أنك سوف تشغله. أشتري منسق النصوص الأسرع processor (لحل التركيب وتنقيحه)، الشاشة الأفضل (لمشاهدة التركيب) والطابعة الأفضل (للخرج الورقي) التي يمكن التزود بها.

(٢، ٢، ١٥) مفاهيم تحتية Underlying concepts

تشتق مواضع الذرات في تركيب من إحداثياتها الكسرية (x, y, z) على محاور خلية وحدة التركيب للبلورة. أي برنامج تخطيطي يحتاج إليه ليقراً هذه، بالإضافة إلى بارامترات الخلية المطلوبة لكي تتحول إلى نظام الإحداثي متعامد التي فيه ستنجز الحسابات الضرورية. إن حزمة المحاور المتعامدة الفعلية (x_0, y_0, z_0) تكون اختيارية وليست مهمة. لو أن البرنامج يقبل ويمكنه استخدام عوامل تماثل الكريستالوجرافية، فإنه يكون من الضروري أن يقرأ فقط تلك الذرات المكونة للوحدة اللا تماثلية كريستالوجرافية crystallographic asymmetric unit: الأجزاء المتكافئة بالتماثل من التركيب، سواء لجزيء يشغل لا نظامياً موقع معين أو لمخطط تعبئة يمكنها من ثم أن تتولد بالبرنامج. لو أن البرنامج لا يمكنه تناول تماثل، فإن كل الذرات المطلوبة للرسم لابد إذاً أن تولد قبل

الإدخال. (أحد الأسباب لعمل هذا قد يكون في استغلال نظام رسم خاص غير متاح في التخطيطات الروتينية التي تستخدمها عادة). للرسم في حد ذاته يستخدم البرنامج نظام إحداثي منفصل (x_p, y_p, z_p) الذي فيه تكون المحاور معرفة نسبة إلى وسط الرسم (عادة شاشة) وتولد الإحداثيات فقط لكي تنتج الرسم. إن محاور نظام الإحداثي هذه تكون معرفة بشكل متنوع في برامج مختلفة وتمثل هذا مصدر ضئيل للالتباس المحتمل لو استخدمت عدداً من هذه.

تحول مصفوفة الدوران (أو المنظر) المطلق الأولى المعرف بالإحداثيات المتعامدة (x_0, y_0, z_0) داخل إحداثيات الرسم (x_p, y_p, z_p) المقابلة لاتجاه المناظر المطلوبة. إن كثيراً من سهولة استخدام برنامج يكون متلائماً مع المرونة والتبسيط التي بها يمكن عمل هذا. الاختيارات الآتية قد تكون متاحة:

- (أ) مُدخل مباشر لتسع عناصر من مصفوفة دورانية (ذات اهتمام محدود)؛
- (ب) منظر على طول محاور الخلية أو اتجاهات بلورية أخرى؛
- (ج) منظر نسبة إلى سمات جزيئية، على سبيل المثال:
- على طول الاتجاه العمودي على متوسط المستوى خلال ذرات مختارة (أو للكل).
- على طول المتجه بين ذرتين (التي لا تكون بحاجة إلى أن تكون مترابطة).

مدخل جيد بصفة عامة هو أن نبدأ بالمنظر بمحاذاة الاتجاه العمودي لمتوسط المستوى خلال كل الذرات اللاهيدروجينية، من ثم أعمل دورانات صغيرة لتتقيد هذا المنظر. أهما دائماً ما تكون فكرة جيدة أن نفحص مدى من المشاهدات، في حال منظر أقل وضوحاً، أثبت لأن يكون الأفضل. إن معظم البرامج سوف تسمح لك بعمل هذا أما بدوران مستمر أو بخطوات تزايدية صغيرة فيما عدا أن يكون لديك تركيب ضخم

جداً أو حاسوب بطيء فإن سرعة الدوران المقصّرة ينبغي أن تكون مقبولة. في الحقيقية مع منسقات نصوص أسرع فإنك تكون بحاجة إلى أن تبطئ معدل الدوران للجزئيات الأصغر لمنع غزلها سريعاً جداً.

تتكون معظم الرسوم من ذرات وروابط تصل بينهما. إن معلومة الترابطية التي تخبر البرنامج أي الذرات ترسم روابط بينها يمكن إدخالها بوضوح بالتوازي مع الإحداثيات، لكن من الشائع للبرنامج أن يحسب صف الترابط مستخدماً قيماً لأنصاف أقطار تساهمية أو أخرى ملائمة لكل ذرة. على سبيل المثال، قد يعتبر البرنامج أن ذرتين تكونان مرتبطتين لو أن مسافة الفصل بينهما أقل من مجموع نصفي قطريهما التساهميين (زائد "عامل فبركة" للتأكد من أن الروابط الأطوال قليلاً لا تكون مفقودة): لو أن نصف القطر التساهمي المقصّر المخزن لذرات الكربون يكون 0.70\AA و"عامل التلفيق" المقصّر 0.4\AA ، فإن أي زوج من ذرات الكربون سوف يعتقد بأنهما مترابطان لو أنهما بحدود $0.7 + 0.7 + 0.4 = 1.8\text{\AA}$ من بعضهما البعض. يكون هذا المفهوم مهماً للمركبات العضوية، حيث تكون أنصاف الأقطار التساهمية معرفة جيداً وعديد من المستخدمين قد لا يكونوا مدركين بالقيم التقصيرية، لأنهم ببساطة لن يكونوا في حاجة إلى تغييرها على الإطلاق. مع المركبات العضو معدنية واللا عضوية لا بد من أخذ مزيد من الحذر للتأكد من أن كل المسافات بين الذرية المناسبة يتم اعتبارها، لكن ليست المسافات غير المطلوبة. يكون من الضروري أن نحرر قائمة الارتباط لكي نضيف أو نحذف مدخلات معينة. سوف تكون هناك حدود على أعداد الذرات والروابط التي يمكن تناولها داخل أي برنامج خاص. هذه الحدود قد تكون موضوعة داخل البرنامج، ربما عند التصنيف أو قد يتم تحديدها بالذاكرة المتاحة.

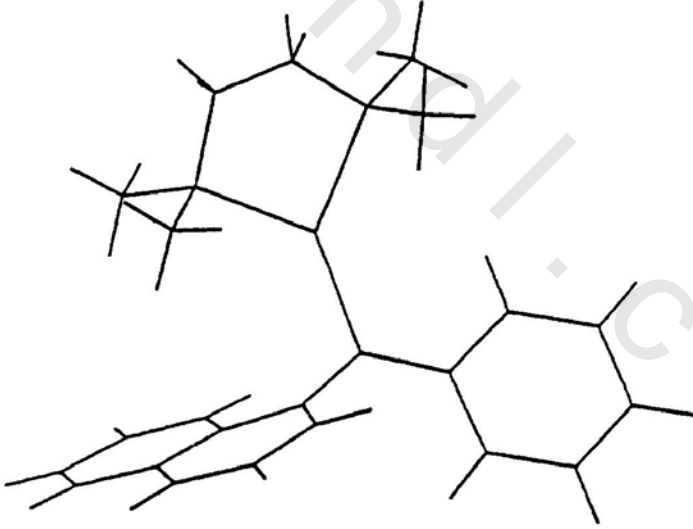
(١٥,٢,٣) أساليب رسم Drawing styles

مدى واسع من التمثيلات يكون ممكناً ومن المهم أن نختاره بشكل مناسب. الأبسط هو رسم العصا stick drawing (الشكل رقم ١,١٥) حيث تمثل الروابط بخطوط مستقيمة؛ تكون الذرات مفهومة ضمناً بتقاطعات الرابطة أو النهايات. تستخدم بعض البرامج هذا التمثيل لتقييم سريع أولي لاتجاه المنظر الأفضل حيث إنه الأقل طلباً بلغة قوة الحاسب (ولهذا تكون الأسرع). قد تكون أيضاً الطريقة الأفضل لعرض بعض الجزئيات المعقدة مثل ستيرويدات steroids حيث إن رسم الذرات كأجسام كروية أو أهليليجية سوف يحجب السمات خلفها.

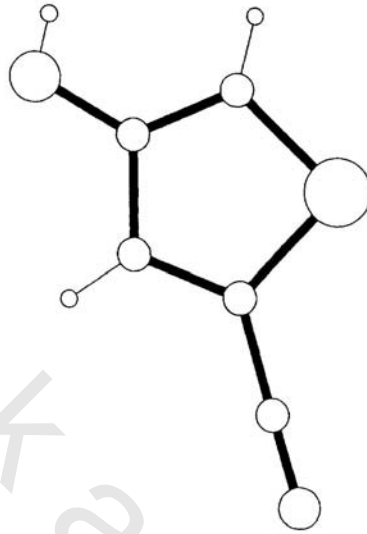
نموذج أكثر ألفة (كرة- و- قضيب شعاعي الشكل رقم ٢,١٥) ball-and-spoke يشمل عرض الذرات ككرات (حلقات في الإسقاط) مع الروابط مبينة كقضبان أسطوانية. يمكن للمستخدم أن يختار أنصاف أقطار الكرات وعرض الروابط، يبدل شكل الرابطة ويضيف تظليل أو أي تأثيرات أخرى للذرات. يبين الشكل رقم (٣,١٥) الأشكال المتاحة في SHELX/PC النسخة 5.03 [3]. مثل هذه السمات يمكن أن تستخدم للتأكيد على سمات ذات أهمية مثل كرة التساند في معقد الفلز (الشكل رقم ٤,١٥). يمكن أن تستعمل أنواع روابط مختلفة لتشير إلى المتصلات المرتبطة بالرابطة π - في المعقدات الفلزية أو تداخلات مثل روابط هيدروجينية داخل الجزئيات.

إن نمط رسم غني بالمعلومات بدرجة كبيرة يشار إليه بشكل عام مثل "ORTEP" بعد إنجازه التاريخي المعروف جيداً [1,2]، واصفاً الإزاحات الذرية كمجسمات إزاحة أهليليجية. لو أن البرنامج يوفر مدى من أشكال مجسمات أهليليجية (مثل تلك المرقمة 4- إلى 1- في الشكل رقم ٣,١٥) فإنه سوف يكون بالإمكان أن تمثل الحركة الذرية (وإلى حد ما) أن نفرق بين أنواع الذرات في نفس الرسم (الشكل رقم ٥,١٥). إن المجسمات الأهليليجية يمكنها أن تتدرج في الحجم لكي تمثل النسبة المئوية الاحتمالية أن نجد من

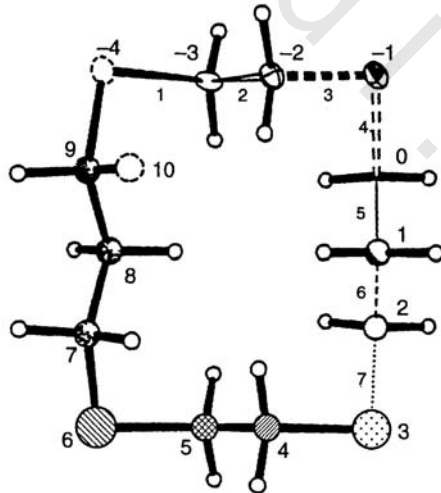
خلالها الإلكترونات حول الذرة حينما تهتز؛ إن مستوى الاحتمالية هذا لا بد أن يستشهد به دائماً في عنوان الشكل وقيمة بنسبة 50% تكون مثالية، رغم أن قيم مثل 20% أو 70% تستخدم في بعض الأحيان للحصول على مشاهد معقولة من تراكيب مع قيم U عالية ومنخفضة على التوالي. إن هذا النوع من الرسم استثنائياً يكون مفيداً في إبراز مشاكل محتملة مثل خلل disorder الذي قد لا يكون واضحاً من قيم U العددية حتى عندما تكون هذه متاحة. في الحقيقة فإن بعض المهتمين بعلم البلورات لا يثقون في رسوم كرة- قضيب شعاعي بسبب أن الخلل وبعض مشاكل أخرى محتملة مثل تصنيفات ذرة غير صحيحة يمكن أن تظل محجوبة.



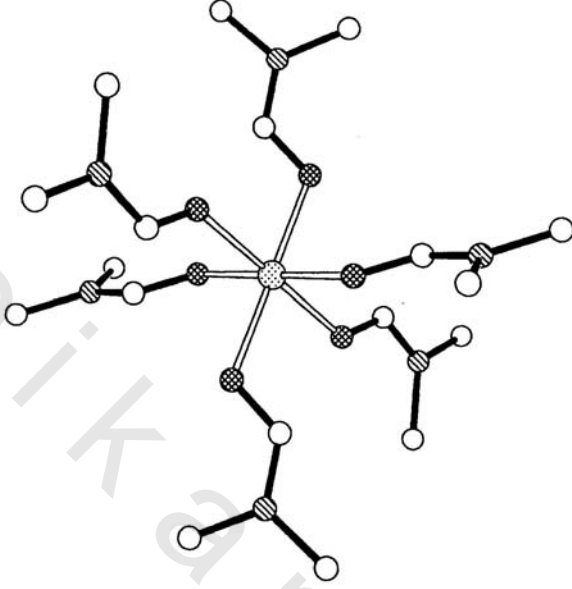
الشكل رقم (١٥, ١). مخطط عصا.



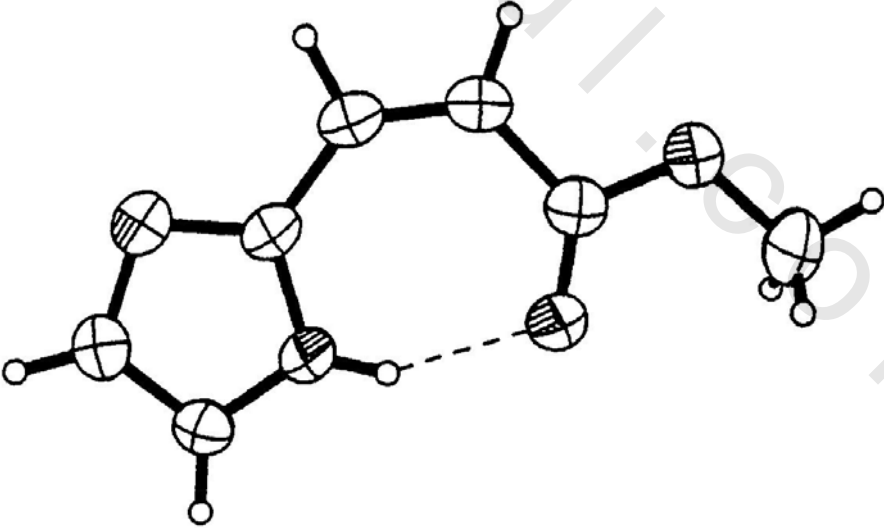
الشكل رقم (٢، ١٥). مخطط كرة- قضيب شعاعي.



الشكل رقم (٣، ١٥). أنماط من ذرات وروابط متاحة في [3] SHELXTL/PC.



الشكل رقم (١٥,٤). استخدام أنماط مختلفة للتفريق بين الذرات والتأكيد على سمات معينة.



الشكل رقم (١٥,٥). رسم مجسم إزاحة أهليلجي مع مستوى احتمالية 50% لذرات لا هيدروجينية.

في الحقيقة لا تتكون الجزئيات من كرات وقضبان شعاعية وتعطي هذه فكرة سيئة عن الشكل الخارجي والمتطلبات الفراغية للجزء. إن تمثيلاً أكثر منطقية يقدم بواسطة رسم مثل ذلك كما في الشكل رقم (١٥,٦) حيث تبدو الذرات مثل كرات لها أنصاف أقطار "فان درفالس" مفضلاً عن أنصاف أقطار مطلقة أصغر بكثير. يشار إلى هذه على أنها رسوم فان درفالس أو "ملء فراغ" ويمكن أن تستخدم في فحص أسئلة مثل هل ذرة الفلز المركزية محاطة بالكامل بمجموعة مرتبة من المتصلة ligand الخاصة بما أم أنها مكشوفة ولهذا يكون من المرجح أكثر أن تخضع لتفاعل. إن البرنامج [7] SCHAKAL يسمح لك بأن تعرض صورة مركبة من رسم كرة- و- قضيب شعاعي لجزئتك من خلال ظرف فان درفالس لها.

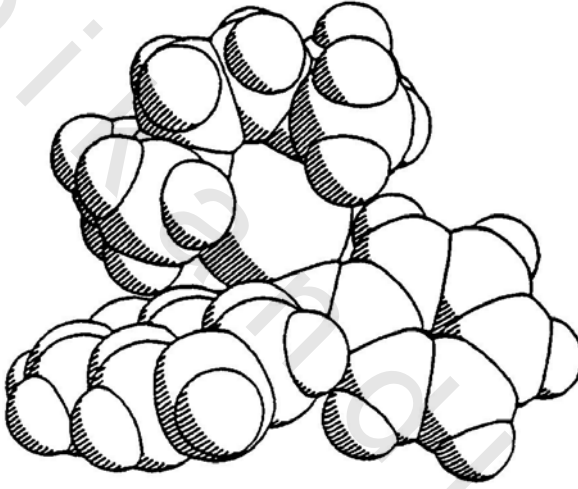
بالإضافة إلى مناظر جزئيات منفردة، قد يكون من المرغوب أن تظهر عدد من جزئيات لتوضيح العلاقات بينها. قد يشمل التداخل ترابط هيدروجيني أو ترابط ثانوي آخر، ترصيص π - π للأنظمة العطرية، أو تداخلات ضعيفة مثل تلك المتضمنة في سلوك بلوري لسائل. مثل تلك التوضيحات تجمع جزئياً تحت اسم "مخططات تعبئة" "packing diagrams"، مثال عليها مبين في الشكل رقم (١٥,٧). يمكن اختيار الجزئيات التي سيتم إدخالها أوتوماتيكياً بالبرنامج (باستخدام معايير مثل مسافة من نقطة مرجعية، أو عدد معين من خلايا وحدة التركيب)، لكن قد لا انتقاء التقصير المخطط الأفضل. يكون من المهم أن نختار ونصمم مخططات تعبئة لكي نحضر النقاط التي ترغب في توضيحها بدون إحداث ضجة غير هامة. لهذا السبب المدخل البديل على نحو صريح لتوليد الجزئيات المتكافئة بالتماثل المطلوبة باستخدام عمليات تماثل وانتقالات الخلية لديه الكثير ليوصى به، رغم أنه أيضاً يتطلب مستوى أعلى من فهم التماثل البلوري ومهارة في السمات الأكثر تقدماً للبرامج التخطيطية. تكون مخططات التعبئة بشكل متكرر بجودة رديئة ومحتوى معلومات منخفض ويُقترح قاعدة عامة "صورة واحدة تقدر بألف كلمة" ينبغي

إضافتها "لكن لو أنها فقط تكون جيدة". لو أن مسألة مخطط التعبئة هي فقط لإظهار أن جزيئاتك تشكل من سلاسل خطية نموذجية قد يكون من المؤثر أكثر أن تنقل هذا في كلمات. مع بعض المجالات تنتهج سياسة نشر توضيح واحد فقط عادة للتركيب، فإن المقدرة أن تنتج رسوم بمحتوى معلومات مرتفع يكون مفيداً جداً. على سبيل المثال، قد يكون من الممكن أن تظهر جزيء واحد والسماوات البارزة للبيئة الخاصة به في تصوير منفرد (مثل الشكل رقم ١٥,٨) بدلاً من اثنين منفصلين. إن التداخلات المهمة بين الجزيئات ينبغي أن تكون واضحة بقدر الإمكان، تقليدياً باستخدام أنواع رابطة مختلفة؛ على سبيل المثال في تركيب يحتوي على نوعين من روابط هيدروجينية بالإمكان أن نفرق بينهما باستخدام خطوط متقطعة ومنقطة، بينما تظهر الروابط العادية (داخل الجزيئات) كخطوط صلبة. لو أن الشكل الخاص بك هو لتمثيل تركيب بلوري كامل، ربما تريد أن تدخل خط محيطي خلية وحدة التركيب، مع المحاور مرقمة. إن ترقيم الذرات المرتبطة بتمائل هو منطقة صعبة قليلاً حيث أن الوسيلة الموصى بها بواسطة بعض المجالات (أرقام لاتينية رمز علوي- الحالة الأخفض) لا تكون متاحة بسهولة في معظم برامج التخطيطات. لحسن الحظ، يكون من الممكن عادة أن نشتغل حول هذا مع شيء من المهارة.

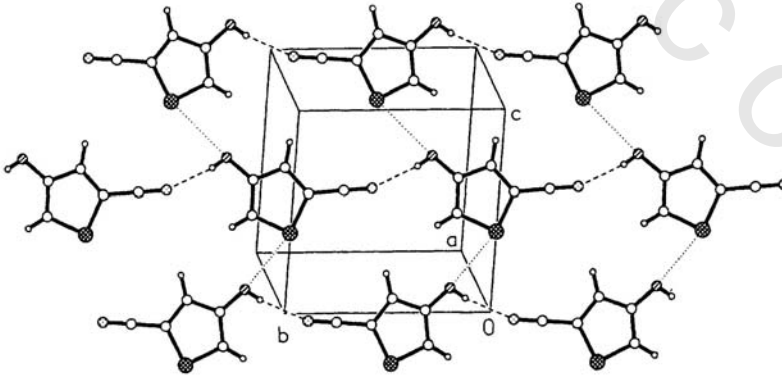
إن العناوين لمخططات التعبئة تكون احتمالياً واحدة من الطرق الأقل استثماراً لنقل معلومات تركيبية. أما غالباً ما تكون محددة إلى الشكل ٢: منظر "التعبئة بلورية" عندما يكون بالإمكان أن تحتوي على معلومة مختصرة حول اتجاه المنظر، التلامسات والمسافات الأكثر أهمية، والترتيب الناتج للجزيئات (انظر الشكل رقم ١٥,٧).

لو أنك تعمل مع مركبات لا عضوية، قد تكون التمثيلات الجزيئية أقل ملاءمة عن رسومات عديدي الأوجه التي فيها تكون مجموعات من ذرات تشكل أشكال عديدي الأوجه (مثل ست أكسجينات حول فلز مركزي قد تكون مرتبطة لتكون ثماني

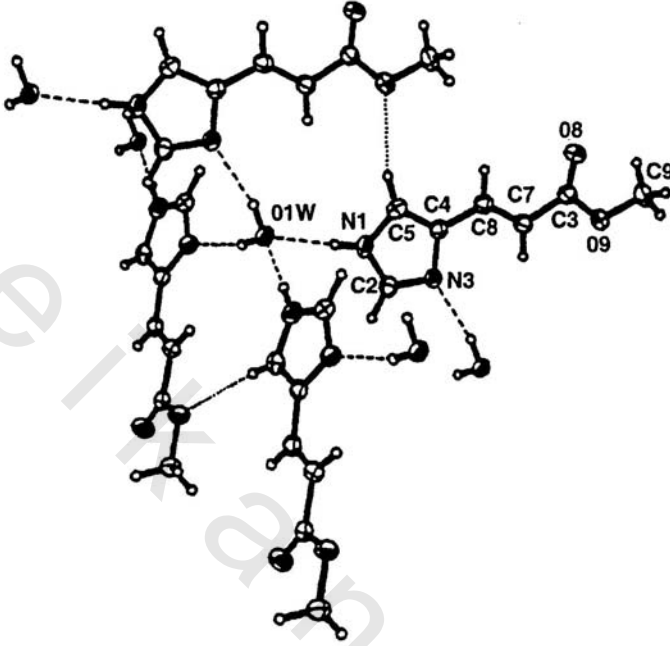
الأوجه) الذي يظهر كأشكال صلبة معتمة، تتصل عديدي الأوجه المتجاورة من خلال قممها، حوافها أو أوجهها لتبني التركيب. كما في مخططات التعبئة للجزيئات فإن اختيار مكافئات بالتماثل مناسبة يكون مهما لقوة تأثير الصورة. الشكل رقم (١٥،٩) هو تمثيل لتركيب لا عضوي منتج بواسطة برنامج STRUPLO [8].



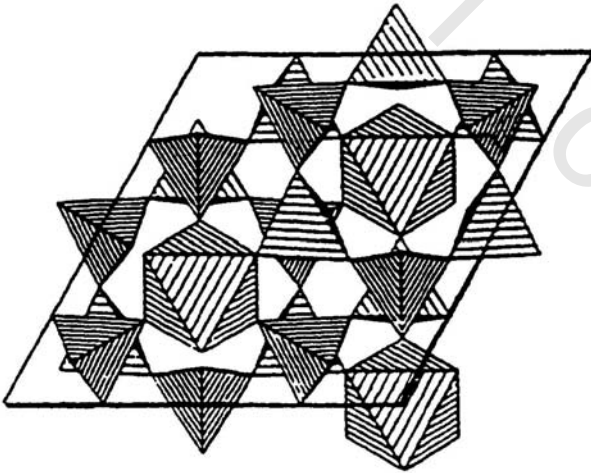
الشكل رقم (١٥،٦). رسم ملء-فراغ.



الشكل رقم (١٥،٧). رسم رص.



الشكل رقم (٨، ١٥). تخطيط مؤلف مظهراً كلاً من جزيء مفرد وبيئته.



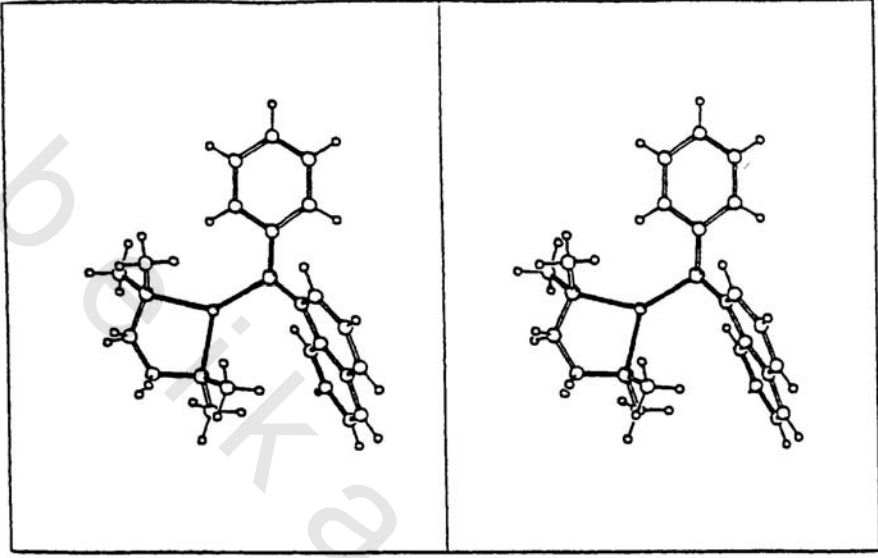
الشكل رقم (٩، ١٥). تمثيل عادي الأوجه.

(١٥,٣) إنشاء صور خادعة ثلاثية الأبعاد

Creating three-dimensional illusions

حتى عندما يمثل تركيب ثلاثي الأبعاد بسيط في بعدين يكون هناك فقد معلومات وللحالات الأكثر تعقيداً قد يكون هذا مضللاً. خدع متنوعة قد تم تطويرها لتعطي صورة خادعة للعمق على الشاشة أو على الورق، شاملة إشارة تمثيل العمق، استخدام الرسم المنظوري، تدرّج رابطة، إزالة خط مخبأ، واستخدام التظليل وأجزاء الصورة الأشد إضاءة. بعض التقنيات (مثل تمثيل العمق) تعمل أفضل على الشاشة منها على الورق بسبب الخلفيات الملونة المختلفة المستخدمة. ربما قد تجد أن برنامج التخطيطات الخاصة بك له البارامترات المطلوبة قد تم نمذجتها بالفعل، لكن على النقيض، فقد يعاد توجيهه لضبط هذه بحيث ينتج التأثيرات الأفضل للمثال الخاص بك. رغم ذلك كن حذراً من عمل تأثيرات بإفراط مثل استخدام الرسم المنظوري أو تدرّج رابطة إلى المدى الذي يجعل النتيجة تبدو وكأنها سخيفة.

الطريقة التقليدية لاستعادة بعض العمق لرسم جزئي مسطح هو بواسطة حث الأستريوسكوبية (المجسمة) stereopsis. يتكون الزوج المجسم "stereo pair" (الشكل رقم ١٥,١٠) من رسمتين، واحداً لكل عين، مع فصل مناسب ودورانات مختلفة طفيفة. عندما تنظر، ينبغي للرسمتين أن يندمجا لكي يعطيا تأثير ثلاثي الأبعاد كامل. مثل تلك الأزواج لا تكون مؤثرة بصفة عامة حيث أن النسبة الأساسية من التعداد الحرفي لا تستطيع أن ترى الهدف منها (هؤلاء الناس لا يمكنهم الحصول على الصورتين لدجهما) وأن فعاليتها ينبغي أن تكون مقارنة للرسم "الأحادي" الشاغل لنفس المساحة.



الشكل رقم (١٥,١٠). رسم مكون من زوج مجسم.

(١٤,٥) استخدام اللون The use of colour

في السنوات القليلة الماضية أصبحت الرسوم الملونة للتركييب البلورية سهلة المنال أكثر بكثير بسبب الإتاحة الأوسع لبرامج الحاسوب المناسبة وتدني أسعار الطابعات الملونة ذات الجودة العالية والرغبة الأكبر التي بها عديد من المجلات سوف تنشر رسوم ملونة، غالباً بدون تكلفة لكن فقط حيث يكون المحكمين مقتنعين بأنها ستحسن العرض بشكل ملحوظ. إن استخدام اللون يكون أكثر تأثيراً حيث يضيء سمات لن تكون معرفة بسهولة بأي طريقة أخرى: على سبيل المثال في تركيب بوليمري، يمكن لذرتي فلز مختلفتين أن يكون لهما منظري تناسق عالي متشابهين وقد يكون مستحيلاً أن نجد متسع من مرقمات ذات حجم معين على نحو ملائم للتفريق بينهما. يمكن لشفرات اللون أن تكون معرفة في عنوان الشكل أو بواسطة مفتاح اللوحة. تشمل تطبيقات أخرى شفرات اللون لروابط أو ذرات مختلفة، إبراز السمات المهمة: شفرات التلوين لجزيئات مختلفة أو

عناصر الزخرفة التركيبية المتكررة مثل مستويات في مخططات تعبئة؛ في بعض الأحيان مجرد أن التلوين يبدو رائعاً على الملصق. كما في عديد من الأشياء الجميلة هناك مميزات في الاعتدال: إن الاستخدام المفرط في الألوان بإمكانه أن يحدث نوع من الارتباك، لو أن كل أو معظم الذرات تكون ملونة فإن كثيراً من مميزات استخدام التلوين قد تفقد. لاحظ أن هناك بعض اتفاقيات غير محكمة معينة حول تلوين الذرات التي يمكنك استخدامها لتوصيل معلومات أكثر: برتقالي إلى B أسود إلى C، أزرق فاتح إلى N، أحمر إلى O، أخضر فاتح إلى F، بني إلى Si، أصفر إلى S، أخضر داكن إلى Cl وأزرق، أخضر أو أحمر للفلزات. إنك غير ملزم بأن تستخدم هذه الألوان، لكن استخدام جداول ألوان أخرى قد يربك بعض من هؤلاء الناظرين إلى الرسم. من المحتمل أن يكون اللون أقل تأثيراً لو أن رسوم محيطية رقيقة لذرة تكون ملونة والألوان تكون ضعيفة: من الأفضل أن نملاً الذرة بلون قوي نابض. إن استخدام التلوين يفتح المجال لاحتمالية استخدام التغييرات في الشدة لنقل معلومة بعمق (تمثيل بعمق).

(١٥،٥) معلومات نصية في الرسوم Textual information in drawing

رغم أن المكونات الأساسية للرسم الجزيئي سوف يكون ذرات وروابط؛ فإنه من الطبيعي (لكن ليس بالضرورة أن يكون أساسياً) أن يشمل على نص، ترقيم الذرة الأكثر شيوعاً مثل Cl، N(2) أو O3 (كما في الشكل رقم ١٥،٨) أو أنواع ذرة (C/N/O). إلا إذا قد تم استخدام لون أو تظليل لتعريف نوع الذرة، فإن الرسم المكون فقط من ذرات وروابط غير مميزة كيميائياً يكون استخدامه محدوداً: تأكد من أن أي ترقيمات تكون بحجم كاف بحيث أنها ستكون واضحة ومقروءة عند أحجامها المختزلة النهائية (لا تكون ضخمة بدرجة تغطي على التركيب) وتوضع بحيث لا تتداخل مع أي ذرات أو روابط. تأكد بوضوح من أن الترقيمات تشير إلى الذرات الصحيحة ولا تدع أي مجال

للشك. لو أن برنامج التخطيطات قد أدخلها بشكل أو توماتيكي، اختبر الأماكن الملائمة لها. إحدى القرارات سواء فيما لو لديك أقواس في ترقيمات الذرة أو لا [أي C24 أو C(24): يتطلب الأخير مساحة أكبر، لكن في بعض الأحيان قد يكون مفيداً لتجنب الالتباس] مثل بعض حروف الطباعة قد يبدو الترقيمين C11، و C11 متشابهين جداً بينما C(11) و Cl(1) يكونا مميزين بشكل واضح]. لو أن البرنامج لا يمكنه تزويدك بالنص الذي تحتاجه، ربما قد تكون قادراً على أن تنقل الرسم إلى برنامج معالجة تخطيطي (مثل Corel-Draw، Powerpoint، PhotoShop) أو استخدام حروف ضاغطة، لم يعد الأستنسل مقبولاً ومعظم المجالات سوف ترفض أن تنقل الترقيمات بخط اليد إلى نسخة غير مرقمة من الرسم. ليس من الضروري أن ترقم كل آخر ذرة، لكن أي ذرات يشار إليها في النص أو في جدول لبارامترات الهندسة الجزيئية المختارة ينبغي أن تكون معرفة: على سبيل المثال، في مركب تناسقي فإن ترقيم الذرة المركزية وذرات المتصلة المانحة يكون كافياً. (بالإمكان دائماً أن ترفق نسخة كاملة مرقمة للمحكمين واحتمالياً للإيداع). فيما عدا أنها تكون بأهمية خاصة (داخلة في ترابط H- أو هيدريدات معقدات عنصر انتقالي) فإن ذرات الهيدروجين لا ترقم عادة.

نص آخر يمكن تضمينه: يكون هذا رائعاً للملصقات، لكن حيث إن الأشكال سوف تخضع إلى اختزال فمن المفضل أن تصبح ورقية (على الورق) لكي تقرأ صلبة، على سبيل المثال، فإن إضافة أطوال رابطة وزوايا إلى الرسم يمكن أن يساعد في التفسير، لكن فقط أن كانت واضحة. لتجنب رسوم مركومة بغير نظام فإن بعض المجالات تمنع هذه الإضافات وتستبعد مثل تلك النصوص عن عنوان الشكل.

(١٥,٦) بعض التلميحات لرسم مؤثرة **Some hints for effective drawings**

(أ) قرر على المحتوى: هذا مثبت بشكل كبير لجزء منفرد لكن يكون هناك اختيار أكبر لمخططات تعبئة. في بعض الحالات تجعل ذرات الهيدروجين من الصعب

مشاهدة باقي التركيب ويمكن حذفها، رغم أنك قد ترغب في تضمين تلك الذرات على ذرات O أو N، على سبيل المثال. يمكنك في بعض الأحيان أن تختزل التراكم غير المنظم بأدوات مثل رسم رابطة منفردة (في شكل مختلف) من الفلز للمركز المتوسط حلقة للبرزين المتساند (أو بنتادينيل الحلقي) cyclopentadienyl بدلاً من الروابط الست (أو الخمس) لذرات الكربون المنفردة. في بعض الأحيان تحتاج إلى أن تحذف مجموعات محيطية أو تظهر الكربون *ipso* فقط حلقة أريل aryl قبل أن ترى الأجزاء البارزة من الجزيء (ينبغي أن تعترف بهذا في عنوان الشكل). في بعض الحالات قد تجد أنه من الصعب أن تظهر كل السمات المهمة في منظر واحد.

(ب) استثمر بعض الوقت بالنظر إلى اتجاه المشاهدة الأفضل مع تقليل التداخل إلى الحد الأدنى، خاصة عندما يتعلق الأمر بذرات مهمة. لو أن ذرة ما ببساطة لا يمكنها المناورة بداخل منظر يمكنك إضافة أسلوب ما مثل أن C8، تكون غير واضحة تماماً بواسطة C7 لعنوان الشكل.

(ج) لو أن السمات المهمة لا تزال غير واضحة، هل بإمكانك تأكيدهم باستخدام أسلوب مميز للذرات أو الروابط الداخلة؟ على سبيل المثال يمكنك تعريف محيط تناسق الفلز بأن يكون لديك أسلوب مميز لروابط متصلة- الفلز. لو أن ذرة لها تناسق إضافي عند مسافة أكبر، يمكن للرابطة (لروابط) الداخلة أن تشاهد بشكل مختلف.

(د) لو أن التلوين يكون مؤثراً، استخدمه باعتدال لجذب الانتباه لسمات منتقاة من التركيب.

(هـ) اختر التمثيل الأكثر تأثيراً لتوصيل المعلومات التي تريدها، مع الأخذ في الاعتبار بأن بعض المجالات قد تكون لها متطلبات محددة. رسوم لمجسمات إزاحة أهليلجية تحتوي على معلومات وافرة، لكنها قد لا تكون هي المعلومات التي تريد

توصيلها. غالباً ما تظهر الذرات الأكثر تميزاً أصغر بسبب أن لها أعداد ذرية وأعداد تناسق أعلى ومن ثم يكون لها بارامترات إزاحة أقل. أكثر من ذلك هناك مدى محدد للتفريق بين أنواع الذرات (لكن انظر شكل ١٥,٥) حيث يسمح نموذج الكرة-قضيب شعاعي بحرية أكثر لتصنيف أنصاف الأقطار الذرية وأشكال الرسم. تجنب استخدام أشكال متشابهة لذرات مختلفة بقدر الإمكان. على سبيل المثال الأشكال 7، 8 و 9 في الشكل رقم (١٥,٣) تبدو متطابقة لو أن الدائرة الممثلة للذرة تكون صغيرة جداً (كما في مخطط التعبئة) أو بعد الاختزال.

(و) تجنب تراكم غير منظم: في بعض الأحيان عليك أن تضيف ترقيمات ذرة، لكن من الممكن أن تكون منتقاة. حذف الأقواس قد يساعد، كما سوف نطلق على ذرة الفوسفور الوحيدة في التركيب P بدلاً من P1 أو P01. أيضاً قد يكون مقدر أنك أن ترقم ذرات الكربون مستخدماً فقط أرقامها (أي حذف نوع الذرة وأي أقواس). إذا لم تكن هناك مساحة لوضع ترقيم قريب بدرجة كافية من الذرة لتعريفها بشكل منفرد اعتبر وضع الترقيم على مسافة ما مع خط أو سهم يشير إلى الذرة.

(ز) خذ حذر خاص مع المناظر الفراغية. هل هي تكون منظر جيد؟ بشكل أكثر أهمية هل هي أفضل من منظر أحادي أكبر شاغلاً نفس الفراغ؟

(ح) كما ذكر سابقاً تطبق معايير مختلفة لتصميمات نشر مختلفة. هل أنت تحضر صورة توضيحية لمجلة، رسالة، ملصق، صفحة موقع إنترنت أو شفافيات علوية؟ لا تنقل شكل بين تصميمات بلا تفكير أو بدون تقييم مدى ملاءمته للتحميل مثل رسم لموقع على الإنترنت يكون معقداً بحيث أنه يأخذ دقائق عديدة عند تحميله، أو الذي يكون مؤثراً فقط على مراقب عالي التحليل، بحيث لا يصل إلى عدد أكبر من المستمعين.

(ط) لو أنك قدمت نتائج إلى مجلة تسمح بعدد محدد من المناظر فقط (مثل واحد) لأي تركيب مفرد، اعتبر فيما إذا الأشكال يمكن أن تتوحد بدون فقد معلومات.

(ي) كن مبدعاً وافرح- هذا الجزء من علم البلورات يسمح لك بخيار أكثر من أي شيء آخر: إن كتيب الاستخدام لبرنامج ORTEP اليدوي الأصلي حض المستخدمين على تحسين المشاهد الأصلية الناتجة من البرنامج: الذي أصبح الآن أسهل عن أي وقت مضى.

Tables of results (١٥,٧) جداول النتائج

سوف تشمل الجداول الرئيسة الناتجة عند نهاية تنقيح التركيب كل أو معظم ما يأتي:

- إحدائيات ذرية كسرية (مع s.u.s؛ انظر الفصل الثالث عشر لمعالجة كاملة لهذه)- واحتمالياً قيم U_{eq} أو B_{eq} لذرات غير-H: قد تكون القيم مضاعفة بعامل مناسب (معطى في عنوان الجدول) لتعطي قيم صحيحة أو يعبر عنها بأعداد كسور عشرية.

- بارامترات إزاحة ذرية- عادة U أو $B^{\text{ذ}}$ مع s.u.s؛

- إحدائيات ذرية كسرية واحتمالياً قيم U_{iso} أو B_{iso} لذرات H التي لم تنقح على نحو مطلق (تلك التي تم تنقيحها بالإمكان إما أن تكون معطاة هنا مع s.u.s أو انتقلت داخل الجدول الرئيس لإحدائيات كسرية).

- بارامترات هندسة جزيئية (أطوال رابطة، زوايا تكافؤ، زوايا التواء، تلامسات بين جزيئية، بيانات لمتوسط مستوى المربعات الصغرى.... الخ) سوف يوجد عادة نسختين من هذه الجداول، قائمة أقصر من بارامترات مختارة للنشر وتسجيل أكمل (للروابط والزوايا على الأقل) للتحكيم والإيداع.

- جداول معامل التركيب.

من الممكن أيضاً أن نجدول بيانات البلورة وتفاصيل تحديد التركيب رغم أن هذا لا يكون فعالاً بلغة الحيز إلا إذا كان بالإمكان أن توحد بيانات لتركيبين أو ثلاث تراكيب على الأقل في جدول واحد. قد يكون للمجلات متطلبات خاصة، لكن لو أنها تكون غير متخصصة (بسبب أن المجلات نادراً ما تنشر تراكيب بلورية) فإن تلك المجلات من American Chemical Society (www.rsc.org) أو Royal Society of Chemistry (pubs.acs.org) Society تبدو لتكون مقبولة على نطاق واسع.

مازالت المجلات مختلفة بشكل ضخم في سياساتها عن البيانات البلورية، ما الذي سوف تنشره، ماذا تطلب كبيانات تكميلية، ما الذي سوف تودعه. قبل أن تبدأ في تجهيز، بحث للنشر، ادرس التعليمات المناسبة للمؤلفين (عادة ما تنشر في الإصدار الأول من كل عام) واتبع تلك التعليمات بعناية. هناك رغم ذلك اتجاه قوي تجاه نشر أقل، وعديد من المجلات قد توقفت عن نشر عوامل التركيب، بارامترات الإزاحة، الإحداثيات الكسرية والهندسة الجزيئية الكاملة (أكثر أو أقل في ذاك النظام على نحو مرتب زمنياً (كرونولوجياً chronologically))، بحيث إن اختيار النتائج للنشر يفترض أهمية أكبر (انظر فيما يلي). عديد من المجلات سوف تقبل بيانات تكميلية في تصميم CIF بدلاً من نسخة ورقية، رغم أن قليل منها مازال يشك قليلاً في البيانات الإلكترونية ويطلب كلاهما. بعض برامج التنقيح سوف تنتج جداول النتائج أوتوماتيكياً، ورغم أن هذه تكون مفيدة فإنها غالباً ما تستفيد دائماً من الفحص الحرج وأحياناً ضبط يدوي للمحتوى والتصميم، لكن لا بد أن تتوخى الحذر بشدة في عدم إدخال أخطاء عديدة أو أخطاء أخرى.

١٥,٨) محتوى الجداول The content of tables

أ) نتائج مختارة Selected results

في الغالب يؤثر هذا دائماً على بارامترات الهندسة الجزيئية حيث إن البيانات الإحداثية تكون عادة مكتملة- من غير المسموح به أن يتضمن فقط الإحداثيات لما

تعتبره الذرات "المثيرة للاهتمام"! إن اختيار البارامترات الهندسية يعتمد على الطبيعة الكيميائية للمركب والسمات التركيبية التي تريد أن تركز عليها. هذه غالباً ما تكون واضحة: في مركب تناسقي ربما تريد فقط أن تضمن الروابط الشاملة لفلز مركزي والزوايا المقابلة له (زوايا التواء تشمل مثل تلك الفلزات قد تنتج أوتوماتيكياً، لكن في معظم الحالات لا تكون ذات أهمية لكي تحفظ)، لكن كل تركيب ينبغي أن يدرس بشكل منفرد. لا توجد ميزة في محاولة نشر أطوال الرابطة التي تم تقييدها أثناء التنقيح، أو تلك التي تكون غير موثوق فيها بسبب أنها تقع في منطقة تركيب متأثرة بخلل. إن تدوين مكثف للهندسة الجزيئية الداخلية لحلقات فيل phenyl تقليدية سواء كانت مقيدة أم لا، تكون مفيدة فقط لأهداف التحكيم والإيداع. في مركبات عضوية عديدة لا توجد أطوال رابطة أو زوايا مهمة أو غير عادية تستحق النشر، لكن قد يكون من المفيد تضمين نخب مختارة من زوايا التواء. إن قيم متوسطة أو نطاقات قد تكون مفيدة لتحل محل عدد كبير من قيم منفردة لبارامترات مشابهة.

(ب) معلومات زائدة Redundant information

حيث يقع جزيء على عنصر تماثل كريستالوجرافي فإن بعض من بارامترات الهندسة الجزيئية له سوف تكون متساوية أو ببساطة مرتبطة ببعضها البعض ولهذا لا تكون بحاجة إلى أن تكون كلها معطاة. وبكلام أدق ينبغي للحزمة الوحيدة أن تكون معطاة ولا تكون أوتوماتيكية رتيبة توليد جداول قادرة على أن تتأقلم مع هذا المطلب. قد يكون من المعقول من ناحية ثانية، أن تضمن بعض معلومات إضافية لجعل الوضع أكثر وضوحاً، خاصة لجمهور المستمعين غير الكريستالوجرافيين. على سبيل المثال أن جزيئات معقدات فلز ثنائية النواة ثنائية الجسرية doubly-bridged dinuclear $M_2(\mu-L)_2$ metal complexes تحتوي على حلقات رباعية العضو وهذه تكون موجودة غالباً واقعة عبر مراكز انقلاب كريستالوجرافية: بالتماثل تكون أطوال رابطة M-L المقابلة متساوية؛

الزاويتين M-L-M متساويتان؛ الزاويتين L-M-L متساويتان؛ تكون الحلقة MLML مستوية تحديداً؛ تجمع الأزواج المتاخمة من الزوايا M-L-M و L-M-L إلى 180° تماماً. تكون البارامترات المستقلة هي طولي رابطة M-L متاخمتان وزاوية واحدة داخل الحلقة. سوف يشمل مستوى مرآة أو محور دوران ثنائي النقلة بدلاً من مركز انقلاب علاقات مختلفة بين البارامترات وسوف تعتمد هذه العلاقات على توجه عناصر التماثل هذه كما هو مشاهد في التمرين (٣، ١٤). تطبق بعض قواعد حسابية مماثلة للوضع الأكثر شيوعاً حيث يحتوي التركيب على ذرة مركزية، غالباً فلز، عند موقع خاص. على سبيل المثال لذرة بلاديوم palladium متناسقة رباعياً على مركز انقلاب يكون لها فقط طولي رابطة مستقلين وزاوية واحدة مستقلة.

عندما تحتوي الجداول على ذرات تكون مرتبطة بالتماثل بتلك في الوحدة اللا تماثلية الأصلية، على سبيل المثال لكي تعطي طول رابطة بين ذرتين مرتبطتين بمستوى مرآة، هذه الذرات لا بد أن تكون معرفة جيداً (مثل $C5'$ ، $C5^*$ و $C5^i$ يمكنها أن تكون مكافئات تماثل للذرة $C5$) وعمليات التماثل المشار إليها بواسطة $'$ ، $*$ أو i تكون معرفة في الهامش.

(ج) مُدخلات إضافية Additional entries

ليست بالضرورة أن تنتج كل المدخلات المطلوبة لجدول هندسة جزيئية أوتوماتيكياً. إن روابط "طويلة" قد تكون مفقودة ويجب أن يتم إدخالها يدوياً؛ تلامسات قصيرة مثل تلك الموجودة في الترابط الهيدروجيني قد تكون محسوبة بطريقة أخرى ولا تكون منقولة أوتوماتيكياً. قد تريد أيضاً أن تضمن "روابط" غير موجودة، على سبيل

المثال لتوضيح أن ذرتين لا تكونا متقاربتين بدرجة كافية للتداخل. هذه القيم وقيم s.u.s لها ينبغي أن تكون محسوبة ببرنامج تنقيح.

(١٥,٩) تصميم الجداول The format of tables

تميل المجالات إلى أن يكون لها متطلباتها الخاصة بها للجداول، التي لا بد أن تُتبع أو قد يصبح لديك مشاكل مع المحكمين أو المحررين. إن الدقة التي بموجبها تكون النتائج مطلوبة تختلف: Acta Crystallographica تفضل s.u.s في المدى 2-19 بينما Dalton Transactions تفضل 2-14، وبعض المحكمين والمحررين يعترضون على s.u.s 1. يعني هذا السماح لأشكال أكثر أهمية لتناسقات العناصر الأثقل. تأكد من أن s.u.s تبدو حساسة وأن أي بيانات إضافية (مثل مكونات U لذرات على مواقع معينة غير مراكز انقلاب) يكون لها العلاقات الصحيحة بين قيمها (وبين قيم s.u.s لها).

تأكد من أن عناوين الجداول غنية بالمعلومات وصحيحة: هل الأسس العشرية المستشهد بها هناك هي فعلاً المستخدمة في الجدول؟ هل بارامترات الإزاحة معرفة بشكل صحيح مثل U أو B؟ هل العناوين على جداول عامل التركيب صحيحة، ومع أي انعكاسات لم تستخدم في التنقيح تكون زاهنة؟ لو أنه ممكناً، نقترح أن يكون لدينا نظام شفري للمركب أو أي شيء آخر للتعريف على كل صفحة من الجداول بحيث لا تختلط التراكيب.

في حين برنامج واحد قد ينتج بارامترات هندسية اعتماداً على الترتيب الذي فيه تقع الذرات في نموذج التنقيح، فإن برنامج آخر قد يعطي الروابط في ترتيب تصاعدي للطول، وهكذا. من الجدير النظر إلى الجداول لرؤية إذا كان هذا يمكن تحسينه. في رأينا، فإن وضوح هذا الجدول لأطوال رابطة مختارة (Å):

| | |
|----------|----------|
| Pd-N6 | Pd-N2 |
| 1.996(8) | 2.017(7) |
| Pd-N4 | Pd-N5 |
| 2.001(6) | 2.035(6) |
| Pd-N1 | Pd-N3 |
| 2.008(7) | 2.057(7) |

يمكن تحسينه أكثر بإعادة الترتيب ليعطي:

| | |
|----------|----------|
| Pd-N1 | Pd-N4 |
| 2.008(7) | 2.001(6) |
| Pd-N2 | Pd-N5 |
| 2.017(7) | 2.035(6) |
| Pd-N3 | Pd-N6 |
| 2.057(7) | 1.996(8) |

(١٥, ١٠) تلميحات على العرض Hints on presentation

(أ) في مجلات البحث In research journals

لقد تم تغطية هذا إلى حد كبير بالفعل. اتبع إرشادات المؤلفين لإرسال أوراق بحثية، متضمنة بيانات عملية، جداول، أشكال وبيانات إضافية. ما هي الحكمة من الرسوم الملونة؟ يمكن لمدي التصميمات للمراجع الأدبية أن يظهر مقلوباً رأساً على عقب ولو أنك ترسل لنطاق واسع من المجالات فإن استخدام برنامج إدارة المراجع قد يكون مفيداً. لو أنك تستخدم المراجع في نفس التصميم فإنه بالإمكان تخزينها في ASCII قياسي أو ملف منسق نصوص word processor.

(ب) في رسائل وتقارير In theses and reports

هنا يكون لديك حرية أكثر، لكن ينبغي أن تكون حريصاً في أن النتائج تكون ملائمة من حيث الأسلوب والطول للهدف الذي لديك: إن الرسالة التي تحتوي على

300 صفحة قد تكون مقبولة، لكن تقرير مؤقت بهذا الحجم يكون سخي. لحسن الحظ فإن الإرشادات تكون عادة متاحة، بالتالي استشر قبل أن تكتب كلمة. لا تعمل جداول بشكل مفرط، من النادر أن يكون ضرورياً أن تضمن جداول عامل التركيب، حتى في الملحق. من ناحية ثانية يمكنك أن تضع جداول بيانات إحصائية وجداول هندسة جزيئية كاملة في الملاحق واحتفظ ببعض المعلومات المنتقاة على الهيكل الرئيس: سوف يحدث هذا تشويش أقل لتدفق (لانسياب) تقريرك. يمكنك أن تكون أكثر كرمًا مع المخططات عندما تنشر في مجلة، لكن تذكر أنه لا بد من وجود سبب قوي لتضمين أي مخطط. هل القواعد المحلية تسمح أن تكون الملاحق مرسله على ميكروفيلم أو CD.

(ج) على الملصقات On posters

اختر النقاط الأكثر أهمية التي تريد رؤيتها. وفر وقتك بتخطيط ما الذي تريد أن تعرضه وليس هناك معنى في إنتاج مادة ليس لها مكان للعرض (هل تعرف حجم وتوجه مساحة عرض الملصق المتاحة لك؟) لا بد للنص أن يكون مقروءاً على مسافة متر أو مترين، قد لا يكون بالإمكان دائماً جذب حشد من الناس، لكن سوف يكون للملصق تأثير أكبر لو بالإمكان مشاهدته على مسافة مناسبة. احتفظ بأي معلومات مجدولة قصيرة ومناسبة. (هل البيانات البلورية مطلوبة فعلياً على الملصق، أو يكون كافياً أن تكون متاحة في حال طلبها؟) إن الملصقات هي مكان يمكن للون أن يستثمر فيه بالكامل، وليس فقط في الأشكال ولكن في النص، مادة الإسناد والمكتنفات. من الصعب أن نفرط في استخدامه هنا، لكن مازال ممكناً! ينبغي أن تجعل كثافة المعلومات نسبياً منخفضة، لهذا ميزة إضافية بأنه سوف يكون لديك شيئاً ما أكثر لتخبر به هؤلاء الذين يبدون الاهتمام في شغلك.

(د) كعروض شفوية As oral presentations

عديد من النقاط المذكورة في حال الملصقات يمكن تطبيقها أيضاً هنا: تجنب شرائح بكثافة عالية أو شفافية علوية overhead transparencies لا يملك أي شخص

الوقت لقراءتها. لا تندفع في أن تستخدم ذلك الجدول الملائم المعد للنشر لو أنه يتكون غالباً من قيم ليس لها علاقة بمحاضرتك.

دالة مهمة للمساعدات المرئية هي تذكيرك بالذي سوف تقوله تالياً، لهذا لا بد أن تكون متوافقة مع محاضرتك، لا بد للمساعدات المرئية ألا تدع جمهور الحضور يرى نتائجك النهائية بينما أنت ما تزال تخطط للموضوع! لو أنك بحاجة إلى أن تشير إلى شريحة أو شفافية عن نقطتين في محاضرتك، فمن الأفضل أن تعمل نسختين بدلاً من إضاعة الوقت في البحث عن النسخة الوحيدة التي قمت بعرضها سابقاً. لو أنك قد قمت بتغطية المادة على شريحة وعملت نقطة تتطلب من الجمهور أن يمتصوا معلومات من الشريحة، لا تترعها فوراً، وتستبدلها مع الشريحة التالية. تكون هذه النقطة مناسبة بشكل خاص لو أن الشريحة تحتوي على مخطط تركيب بلوري.

شكل أدواتك البصرية المساعدة. بعناية حاول أن تستكشف حجم قاعة الاجتماع وإمكانياتها. أن خلط الشرائح والشفافيات تتطلب بعض التخطيط للتأكد من عدم فقد مسار ما تقوله. لو أنك غير خبير فمن الآمان أن تكون لديك كل البصريات في نفس التصميم لو أمكن. (استخدم جهاز إسقاط فيديو أو أي تسهيلات متقدمة تتطلب تخطيط وتدريب، حتى للمحاضرين المتمرسين). يمكن للتلوين أن يكون مفيداً جداً خاصة عندما يستخدم في توضيحات بسيطة وثخينة.

لا تحاول أن تغطي مادة كثيرة جداً. سوف يكون المستمعين أقل تالفاً مع مادتك عنك ولن يكن من المفيد أن تتحدث سريعاً جداً. جدول محاضرتك زمنياً مقدماً. إن (دورة) جلسة فعلية من مستمع متعاطف قد تكون فكرة جيدة لو أنك غير معتاد على التحدث في حضور عام. لا بد أن تقيم مكون مستمعك مقدماً. لو أنهم ليسو خبراء في مجالك فقد تحتاج إلى إعطاء خلفية أكثر من المعلومات بحيث يتفهموا المحتوى، قبل أن تبدأ في وصف الشغل الخاص بك ونتائجه.

قد تكون الدعاية فكرة جيدة لجذب اهتمام المستمعين لكن تحتاج إلى أن تستخدم بعناية إلى حد ضئيل. في بعض الأحيان قد تكون غير ملائمة بالمرّة. لو هناك شك، تجنّب.

(هـ) على صفحة الانترنت On the web

إن صفحة الانترنت هي وسط ممتاز لنشر نتائج بحث، لكن يكون له متطلباته. إن السرعة التي يمكن بها للبيانات أن تنقل تكون محدودة: حيث أن تركيب شبكة عنكبوتية أسرع يكون مطلوباً لهذه لتحمل طلبات استخدام أكثر مرتبطة مع الزيادة المستمرة والمطرودة في عدد المستخدمين، يؤكد هذا أن عرض النطاق الترددي تكون محدودة. كنتيجة لهذا فإن صفحات الإنترنت الأكثر تأثيراً هي تلك التي لا تشمل نقل بيانات على نطاق واسع لكي تكون مفيدة. يكون المؤلفين في حاجة إلى تذكر أن عدد من المستمعين المحتملين ربما يستخدمون عتاد حاسوب متواضع وليست برامج حديثة وان استعمال المؤلفين لسمات جديدة من النسخ الحديثة لا يعوق هؤلاء المستمعين. بالاتصال بهم، لا بد لصفحة الإنترنت أن تكون مقروءة ومشاهدة ببرنامجي التصفح الأكثر شيوعاً (Netscape Navigator and Internet Explorer).

يجب أن يكون واضحاً أن موقع التصفح لا بد أن يصمم بحيث يجد الزائر المعلومات بسهولة، حيث أن مواقع عديدة تكون محبطة للنظر ومركبة بشكل رديء بحيث تصبح مستهلكة للوقت، غير مؤثرة ومحبطة. لو أن لديك موقع تصفح مفصل لا بد أن تفكر جيداً في كيفية تركيبه وبخاصة لو أن الصفحة الدليلية الخاصة بك تتيح للزائر أن يبدأ الإبحار فيها بسهولة.

أيضاً بالنسبة إلى النصوص والمخططات المعقدة، يتيح النشر على صفحة الإنترنت احتمالية التوضيحات التي ربما تكون بالدوران أو أي وسيلة أخرى طبقاً إما لإرشادات مبرمجة لك أو لمدخلات المستخدم. يسمح لهذا بمشاهدة تراكيب معقدة ومخططات تعبئة،

على سبيل المثال هذه السمات تكون محققة بواسطة امتدادات (VRHL) Virtural Reality Modelling Language لبرنامج المتصفح الخاص بك.

إن نشر النتائج على صفحة الإنترنت يختلف كثيراً عن عرضها على ملصق تقوم بإنزاله بعد انتهاء المؤتمر. بمجرد وضعها على صفحة الإنترنت، يفترض للمادة قدراً كبيراً من الاستمرارية حيث يتم تقييمها، تخزينها، نسخها بتصميمات أخرى وطبعها. من الناحية الثانية، مثل تلك النتائج قد تكون سريعة الزوال أكثر من تلك المنشورة في مجلة، حيث يمكن إزالتها، تحسينها أو تحديثها. إن تضمين حقوق الطبع لنشر نتائجك على صفحة الإنترنت تكون غير واضحة بدرجة كبيرة، لكن من المحتمل أن تصبح هذه أكثر خطورة مع انتشار النشر الإلكتروني. كما في أشكال النشر الأخرى، فإن وضع النتائج على صفحة الإنترنت ينبغي أن يتم عمله بالشكر والموافقة لكل هؤلاء الذين ساهموا في هذا العمل و فقط عندما تكون تبعات عمل هذا يتم استثمارها بالكامل.

(١١, ١٥) حفظ النتائج Archiving of results

رغم أن بعض نتائج تحديدات التركيب الخاصة بك سوف يتم إيداعها في قاعدة بيانات بعد النشر، فإنه ينبغي أن تحتفظ بنسخ خاصة بك لكل الملفات المناسبة والمعلومات الأخرى بطريقة آمنة يمكن الوصول إليها. يعلم معظم الكريستالوجرافيين الإحباط في الإعلان عن تحضير تركيب للنشر، فقط لكي يجدوا أن بارامتر معلمي ما مثل لون البلورة أو نوع جهاز قياس الحيود المستخدم لا يكون متاحاً بشكل مباشر ويجب البحث عنه خارجياً. في الماضي القريب كانت الطريقة الآمنة الوحيدة هي حفظ كل جزء من المخرجات المولدة في أي وقت للتركيب، لكن الآن فإن أدوات حفظ وانتقال مثل تصميم CIF يسمح بعمل هذا بشكل أكثر دقة. إن "المكتب اللا ورقي" "paperless office" الموعود بواسطة أنصار تكنولوجيا المعلومات من عهد مضى ربما

يكون قد تم إثباته بصورة خادعة في مكان ما، لكن في معمل كريستالوجرافيا حديث فإنه تم تجسيده بشكل كبير. إن CIF واستخداماته موصوفة بالتفصيل في الفصل السادس عشر.

عند حفظ بيانات تكون الاعتبارات الأساسية هي الأمان وسهولة المنال. للعنونة، نحتاج أولاً إلى أن تحتفظ بنسخ احتياطية من ملفاتك، من الممكن على شريط، وتضمين المجموعة التي سوف تقاوم حريق، فيضان والسرقة في مكان عملك. قد يشمل هذا أمان ضد الحريق لكن حفظ سند بالمتزل من المحتمل أن يكون شيء يعول عليه. إن حفظ كل الملفات لتركيب واحد معاً يساعد على التنظيم، وتسمح المفيدات مثل PKZIP ومتغيرات نوافذ متنوعة لهذه أن تكون مضغوطة في ملف حفظ واحد مع إضافة حفظ مهم على مساحة القرص. لسهولة المنال فإنك تحتاج إلى نوع ما من التصنيف بحيث يمكن بسهولة التعرف على التراكيب المطلوبة. قبل أن تبدأ في الاعتماد عليها لا بد أن تفحص أعمال أسلوب السند الاحتياطي بإعادة تخزين بعض الملفات التقليدية من الأرشيف. إن معظم أجهزة المستندات الاحتياطية لا تأتي فقط مع برنامج لتشغيلها لكن مع المستندات التي تحتوي على نصيحة لكيفية إنجاز ملف احتياطي مناسب وفعال. ينبغي لهذه المستندات أن تشمل على شرح لكيفية استعمال الملفات الاحتياطية الكاملة والمتزايدة، يشير الأخير إلى الطريقة التي بواسطتها يمكن للملفات التي تغيرت منذ المستند البديل أن تنقل إلى الأرشيف.

هناك طريقتان متميزتان لتدعيم حاسوب خاص. تتطلب الأولى وسط حفظ بسعة مناسبة لتسمح لك أن تستبدل كل شيء على الحاسوب، شاملاً أنظمة تشغيل، تطبيقات وبيانات. سوف يسمح لك هذا أن تعيد تخليق بيئة التشغيل في حال فشل عتاد الحاسوب بشكل كامل وتتطلب وسط احتياطي بنفس السعة كما في عتاد الحاسوب الخاص بك. الحل الأمثل ربما يكون من نوع ما من شريط تشغيل ونماذج بذاكرات تصل

إلى عشرات عديدة من الجيجابايت تكون متاحة حالياً. مستوى آخر من السرية يمكن تقديمه بنقل اسطوانة غير مرنة إلى قرص غير مرن آخر فيزيائي *physical* (لا يكون جهاز تشغيل مختلف على نفس القرص) على الحاسوب. إن هذه الحماية سوف تقاوم أي فشل لقرص التشغيل وتلف الجهاز. لو أن الحاسوب محمي فوق الشبكة العنكبوتية قد يكون بإمكانك الاعتماد على هذا، لكن تأكد من أن تكرار الحماية backup يكون مناسباً وأن الملفات الاحتياطية تكون سهلة النال. تذكر تحديث ملفات الحماية عندما تقوم بعمل أي تغييرات على الجهاز، على سبيل المثال بعد أن يتم تركيب وتشكيل تطبيق جديد.

إن المدخل الثاني هو الحماية المنتظمة للبيانات الجديدة وسوف تعتمد الأوساط التي يمكن استخدامها على حجم هذه البيانات. إن الملفات الرئيسية التي سوف تحفظ بعد نهاية تحليل التركيب قد تصل إلى بضع مئات من الكيلوبايت kilobytes بعد الضغط ويمكن حفظ تراكيب عديدة على أقراص ممغنطة 3.5 بوصة قياسية. قد يكون نفس الشيء للملفات المهمة من جمع بيانات على جهاز قياس حيود رباعي الحلقات، لكن تشغيل إطارات جمع بيانات واحد باستخدام جهاز قياس حيود كاشف يحتل مساحة مئات عديدة من الميجا بايت ويكون الحفظ على CD-ROM اختيار حساس.

عندما تخطط لعمل نظام حماية فإن العامل المهم هو سهولة الاستخدام. إن أي صورة تكون مرهقة ومستنفذة للوقت لا يكون من المحبذ تشجيع إجراؤها بشكل منتظم. إن أوساط الحفظ يمكن أن تتغير وتتطور بسرعة مثل سمات أخرى لعتاد الحاسوب وإن عوامل مثل السعة، التكلفة، التلاؤم، والمتانة في حاجة إلى اعتبارها. ليس من الأفضل بالضرورة أن تواكب أحدث التكنولوجيا، في الحقيقة قد يكون من الأمان أكثر أن نختار ما هو مقبول على نطاق واسع بحيث تبقى المستهلكات مثل الأشرطة متاحة للإفادة اليومية من الحاسوب. يعطي الجدول التالي ساعات (تقريبية في بعض الأحيان) لأوساط التخزين المتنوعة:

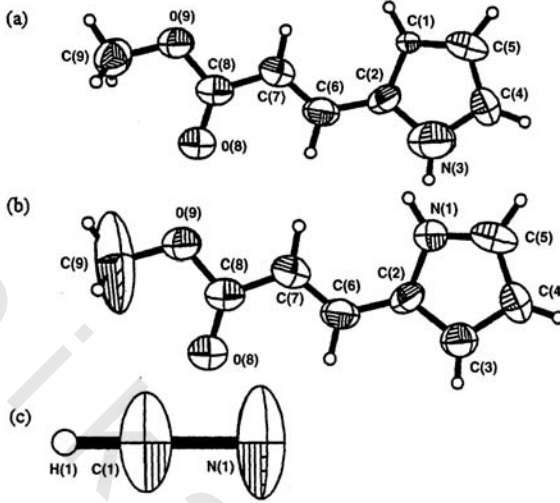
| الوسط | السعة |
|------------------|------------------------|
| قرص 3.5 بوصة | 1.44 ميغايت |
| قرص مرن - ممتاز | 120 ميغايت |
| خرطوشة Cartridge | 100 ميغايت - 20 جيغايت |
| قرص مضغوط CD-ROM | 550 - 650 ميغايت |
| دي في دي | إلى 5 جيغايت |
| شريط Tape | 400 ميغايت - 70 جيغايت |

مراجع References

- [1] C. K. Johnson, *ORTEP*, Report ORNL-3794, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 1965.
- [2] C. K. Johnson, *ORTEPII*, Report ORNL-5138, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 1976.
- [3] G. M. Sheldrick, *SHELXTL XP* graphics module: various versions, and for different platforms (e.g. PC, SGI), Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA.
- [4] L. J. Pearce, D. J. Watkin and C. K. Prout, *CAMERON*, University of Oxford, 1994.
- [5] S. R. Hall and D. du Boulay (eds), *XtaLGX*, University of Western Australia, 1995.
- [6] L. J. Farrugia, *WinGX-A* Windows program for crystal structure analysis, University of Glasgow, Scotland, 2001.
- [7] E. Keller, *J. Appl. Cryst.*, 1989, 22, 19.
- [8] R. X. Fischer, *J. Appl. Cryst.*, 1985, 18, 258.

تمارين Exercises

(١٥,١) ما هي المشاكل المحتملة المشار إليها بواسطة رسوم مجسم الإزاحة الأهليلجي في الشكل رقم (١٥,١١)؟



الشكل رقم (١٥, ١١). رسوم مجسم أهليلجي لتمرين (١٥, ١).

(١٥, ٢) جهز عنواناً للشكل رقم (١٥, ٨). ما الذي يمكن إضافته إلى الشكل لزيادة محتوى المعلومات الخاصة به: كيف ستؤثر هذه الإضافة على العنوان؟

(١٥, ٣) أرسل هذه الجدول للنشر. كيف يمكن تحسينه؟

الجدول رقم (٢).

| | | | |
|---------|-----------|---------|----------|
| Cd4 O4 | 2.102(9) | Cd4 S4 | 2.278(4) |
| Cd4 S2 | 2.281(4) | Cd2 Cl2 | 2.381(4) |
| Cd4 Cd1 | 4.204(1) | Cd3 O3 | 2.125(9) |
| Cd3 S3 | 2.258(4) | Cd3 S4 | 2.307(4) |
| Cd3 Cl3 | 2.364(4) | Cd3 Cd2 | 4.171(1) |
| Cd2 O2 | 2.073(11) | Cd2 S2 | 2.265(4) |
| Cd2 S1 | 2.306(4) | Cd4 Cl4 | 2.342(4) |
| Cd1 O1 | 2.182(8) | Cd1 S1 | 2.263(4) |
| Cd1 S3 | 2.294(4) | Cd1 Cl1 | 2.345(4) |

(١٥, ٤) كيف يمكن تحسين هذا الجدول التالي قبل تضمينه في رسالة؟

الجدول رقم (١). بيانات بلورة وتفتيح تركيب لـ 1 عند 150(2).

| | |
|-----------------------------------|--|
| Empirical formula | C ₂₄ H ₃₃ N ₃ |
| 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 > 2σ(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 > 2σ(I)] | R ₁ = 0.0585, wR ₂ = 0.1304 |
| Final R indices (all data) | R ₁ = 0.0975, wR ₂ = 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 + 2Fc ²)/3 |
| Largest diff. peak and hole | 0.21 and -0.21 e.Å ⁻³ |