

В.Ю.Лунин

Введение в кристаллографию макромолекул

Эти три лекции были прочитаны студентам второго курса факультета биоинженерии и биоинформатики МГУ осенью 2006. Цель лекций - неформальный рассказ о том, каким образом возникает информация о структуре белков, представленная в Protein Data Bank. Лекции не предполагали знаний математики, физики и химии, выходящих за пределы школьной программы.

Данный текст является записью звуковых комментариев к содержанию диапозитивов файла Lunin_MSU06_Pictures_1.pdf. Запись сделана в процессе подготовки лекций. Она не подвергалась литературной обработке и не является записью собственно лекции. Цель записи - обозначить круг вопросов, планируемых к обсуждению при показе того или иного слайда.

Цифры в тексте дают ссылку на номер слайда, соответствующего данному куску текста.

Лекция 1.

1

Мы начинаем сегодня краткий курс "Введение в кристаллографию макромолекул".

2

Этот курс будет состоять всего из трех лекций. И прежде, чем к нему приступить, я бы хотел сделать несколько вводных замечаний:

1. Рентгеноструктурный анализ является самым дорогим и самых трудоемким из экспериментальных методов, применяемых в молекулярной биологии. Единственным его оправданием является то, что при его помощи получается информацию, которую нельзя получить никакими другими методами.
2. Современный рентгеноструктурный анализ включает в себя последние достижения в ряде наук: биологии, химии, физике, математике. Поэтому в рамках столь короткого курса я не могу дать детальное изложение всех аспектов этого метода. То, что я буду говорить - это схематическое и очень упрощенное изложение этого метода, обзор с высоты птичьего полета. Поэтому, если вам придется сталкиваться с этим методом более подробно, то для этого потребуется изучение более специальной литературы более подробным образом.
3. Рентгеноструктурный анализ является непрямым методом исследования в том смысле, что получаемая в эксперименте информация содержит и дает нам информацию о структуре не в прямом, а в зашифрованном виде. То есть результат эксперимента не имеет видимой связи с тем, что мы хотим знать о структуре объекта. Поэтому существенную часть метода составляет вопрос о том, как нам расшифровать полученные экспериментальные данные и восстановить ту информацию, которая нам на самом деле интересна.

3

Рентгеноструктурный анализ позволяет получить информацию о структуре с атомным разрешением, то есть увидеть детали структуры, сопоставимые с расстояниями между отдельными атомами. Прежде чем приступить подробно к его изложению, я хочу сказать вкратце, какие вообще бывают методы, которые позволяют определять детали структуры с атомным разрешением.

Основным методом является рентгеноструктурный анализ, который дает наибольшее количество существующей сейчас информации о структурах на атомном разрешении. О нем я буду говорить в этих трех лекциях.

Второй из экспериментальных методов - это так называемый двумерный ядерно-магнитный резонанс. Этот метод интенсивно развивается и применяется. Он имеет некоторые преимущества перед рентгеноструктурным анализом: для рентгеноструктурного анализа исследуемый образец надо приготовить в специальном виде, в виде монокристалла, а ЯМР - исследование проводится с белками, находящимися в растворе. Однако, возможности ЯМР существенно меньше, чем рентгеноструктурного анализа, и поэтому большая часть информации, которая сейчас имеется, повторяю, получена именно рентгеноструктурным анализом.

Дальше существуют два метода, близких по теории к рентгеноструктурному анализу - это методы, основанные на дифракции электронов, и методы, основанные на дифракции нейтронов. Эти методы тоже имеют свои некоторые преимущества, но по степени развития они сильно уступают рентгеноструктурному анализу, потому что по ряду чисто практических причин их применение сталкивается с еще большими сложностями, чем рентгеноструктурный анализ.

Наконец, последнее время получили развитие и продолжают развиваться методы, связанные с трехмерной реконструкцией изображения объекта по данным электронной микроскопии. Но этот метод применим (на сегодняшний день, по крайней мере) к исследованию только очень больших комплексов (таких, как рибосома) и позволяет получить только довольно грубую информацию об объекте, не на уровне атомного разрешения.

4

Как я уже сказал, рентгеноструктурное исследование включает в себя довольно много различных этапов, принадлежащих к различным областям науки. Это биология, биохимия - получение белка, его очистка, получение кристаллов исследуемого вещества. Это экспериментальная физика: получение интенсивного рентгеновского излучения, системы регистрации экспериментальных данных. Это физические теории, которые позволяют понять, что же мы получаем в процессе эксперимента, каким образом шифруется информация о структуре того объекта, который мы изучаем. Ну, и, наконец, математика и компьютерные технологии, которые позволяют расшифровать полученные данные и представить получаемые результаты в обозримом виде.

5

На следующих двух слайдах показана общая схема рентгеноструктурного исследования, о которой мы будем говорить следующие три лекции более подробно.

Эксперимент заключается в том, что сначала приготавливается кристалл исследуемого вещества. Этот кристалл помещается в пучок мощных рентгеновских лучей. Для того, чтобы получить рентгеновский пучок нужной интенсивности, сейчас обычно применяется синхротронный ускоритель. Здесь приводится фотография синхротронного ускорителя в Гренобле (слева вверх). Это кольцо - это как раз кольцо синхротронного ускорителя. Кристалл помещается в пучок рентгеновских лучей, и регистрируется интенсивность рентгеновских лучей, расходящихся от кристалла в разных направлениях. Почему вдруг в разных направлениях возникают рентгеновские лучи - мы поговорим позже.

Интенсивность этих рентгеновских лучей фиксируется - например, при помощи фотопленки. И получается вот такая картинка (справа). Разные вещества дают разную картину рассеяния. Здесь мы видим плоскую картинку, называемую также рентгенограммой. Но нужно помнить о том, что регистрация происходит в разных направлениях рассеяния и при разной ориентации кристалла относительно падающего пучка, поэтому получаемый экспериментальный набор данных является трехмерным.

Рентгенограммы отличаются друг от друга расположением пятен и их интенсивностью. Вы видите, что пятна бывают более темные и более светлые. Каждое такое пятно характеризуется координатами (они называются индексами и являются целыми числами). Для каждого пятна измеряется интенсивность, которая записывается в специальный компьютерный файл. В рентгеновском эксперименте количество таких записей может достигать сотен тысяч и даже миллионов записей. Позже в лекциях наравне со словом "запись" я буду употреблять слово "рефлекс" или "отражение". Это связано с тем, что одно из объяснений процессов, происходящих в рентгеновском эксперименте - это отражение падающего пучка лучей во внутренних плоскостях кристалла. Отсюда - рефлекс, по-русски - отражение. Таким образом, регистрируется очень большой объем экспериментальной информации: сотни тысяч и даже миллионы рефлексов. При этом интересующая нас информация о внутреннем устройстве белковой молекулы зашифрована именно в этих интенсивностях. Для того чтобы понять, как же интенсивность этих пятен связана с изучаемой структурой, в начале 20-го века была разработана кинематическая теория рассеяния. Эта теория позволяет установить связь между экспериментальной информацией и изучаемой структурой и рассчитать картину рассеяния по известной структуре объекта.

6

Нас интересует обратная задача - восстановление неизвестной структуры объекта по полученной в эксперименте картине рассеяния. Поэтому второй этап исследования - это расшифровка структуры. На этом этапе путем специальных математических приемов рассчитывается функция, характеризующая распределение электронов в изучаемом объекте. Для этой функции компьютерными методами получаются специальные карты.

Справа на слайде мы видим пример такой карты. По этим картам строится предварительная атомная модель объекта, когда атомы помещаются в места наибольшей электронной плотности. Затем модель уточняется. И уже уточненные параметры этой модели помещаются, например, в Protein Data Bank в виде специального файла (так называемый PDB-файл; на слайде справа внизу). В этом файле представлен список всех атомов структуры, а также

приведены их координаты и еще некоторые параметры, о которых мы поговорим позже.

Масштабы изучаемых объектов

7

Прежде чем приступить собственно к обсуждению метода, я хочу поговорить о масштабе рассматриваемых событий. Молекула белка представляет собой полипептидную цепь, сложным образом скрученную в пространстве.

На слайде показан фрагмент такой полипептидной цепи - пептидное звено. Это звено состоит из отдельных атомов, и здесь приведены характерные расстояния между этими атомами. Основной единицей измерения, используемой в рентгеноструктурном анализе, является один **ангстрем**. Это десять в минус десятой метра. И это величина, примерно сопоставимая с расстоянием между отдельными атомами. Кроме величины ангстрем, применяется метрическая система измерения - один **нанометр**, которая представляет собой десять в минус девятой метра. Это одна тысячная микрона. Легко понять, что один нанометр - это десять ангстрем. Так исторически сложилось, что в рентгеноструктурном анализе используется единица 1А как более сопоставимая с межатомными расстояниями.

Можно рассмотреть в несколько более крупном масштабе укладку полипептидной цепи в пространстве. Здесь приведены два участка такой полипептидной цепи, которые находятся в конформации так называемого бета-слоя. Бета-слой - это часть молекулы белка, образованная вытянутыми участками полипептидной цепи, стабилизированная водородными связями. Здесь характерные расстояния - порядка трех ангстрем. То есть три ангстрема - это расстояние между параллельными участками цепи в трехмерной укладке белка.

Если мы посмотрим, наоборот, в более мелком масштабе, как устроен уже отдельный атом, то атом является весьма сложным объектом. Существуют разные модели, как устроен атом. Одна из простейших - модель Бора. В рамках этой модели считается, у нас есть ядро, состоящее из протонов и нейтронов. Вокруг этого ядра по некоторым орбитам вращаются электроны. Размеры этого ядра - десять в минус четвертой ангстрема. С точки зрения того, о чем мы будем далее говорить, мы можем считать, что эти размеры совершенно несущественны. На таком уровне точности мы работать не будем. То есть в рамках нашего курса ядро является точкой.

Теперь, если мы посмотрим, на каком расстоянии от ядра находятся электроны, то в простейшем атоме, атоме водорода, радиус орбиты электрона - примерно пол-ангстрема. Более точно - 0, 539... ангстрема. Существует даже специальная единица измерения длины - 1 Бор, которая равна как раз вот этому радиусу атома орбиты водорода. Я в нашем курсе нигде больше такой единицей измерения пользоваться не буду. Но я о ней упоминаю, потому что, например, в работах по квантовой химии часто применяется именно эта единица. Надо к этому быть морально готовым.

8

Как я сказал, основное положение модели атома Бора - электрон вращается вокруг ядра по некоторой орбите. Конечно, такое представление очень грубое. Более правильное представление заключается в том, что существует некоторое электронное облако - область в пространстве, в которой в основном пребывает

электрон. То есть мы не можем относительно такого квантового объекта, как электрон, сказать точно его координаты, а можем только сказать, что есть некоторая область в пространстве, где этот электрон в основном и находится. Такая область. Эти орбитали могут иметь разную форму.

В простейшем случае - такие вот сферические орбитали. То есть область, где, в основном, находится электрон, является таким шариком. Но орбитали могут иметь более сложную форму. Здесь показаны разные возможные формы орбиталей.

9

При образовании ковалентной химической связи орбитали, отвечающие различным атомам, объединяются, получается объединенная электронная плотность.

10-11

Вид такого объединенного электронного облака может быть достаточно сложным. Для простых соединений орбитали могут быть рассчитаны методами квантовой химии, или, как сейчас еще говорят, компьютерной химии. Суть этого подхода заключена в том, что решается некоторое фундаментальное уравнение, так называемое уравнение Шредингера. Решением этого уравнения является некоторая функция в пространстве, которая называется волновой функцией. Одна из интерпретаций этой функции заключается в том, что квадрат модуля функции передает вероятность обнаружить электрон в той или иной точке пространства. То есть области, где квадрат модуля этой волновой функции большой - это и есть те самые орбитали, о которых мы только что говорили.

Но я должен сказать, что такой расчет возможен только для очень простых соединений. И на сегодняшний момент его возможности находятся далеко за пределами того, что необходимо, скажем, чтобы определять структуру молекул белков или других сложных биологических молекул. Но, тем не менее, эти методы позволяют рассчитать форму электронного облака для отдельного атома или для простых соединений. Поэтому в дальнейшем, говоря о проблеме определения структуры, мы будем предполагать, что распределение плотности в отдельных атомах мы знаем. Будем считать, что эта информация получена заранее, например, из квантовой химии. Ее можно также получать и некоторыми экспериментальными методами.

Основная идея рентгеновского эксперимента

12

Основа рентгеновского эксперимента заключается в том, что рентгеновские лучи взаимодействуют с электронами входящих в объект атомов. Поэтому, с "точки зрения рентгеновских лучей", исследуемый объект описывается функцией распределения электронной плотности.

Грубо говоря, функция распределения электронной плотности показывает количество электронов, находящихся в каждой точке пространства. Поскольку электроны не покоятся в точке, а совершают непрерывные движения, то более точный смысл этой функции такой: если мы возьмем какую-то точку R и выделим маленький объем в окрестности этой точки, объем dV , то средний по времени электронный заряд в этом объеме равен произведению плотности на этот элементарный объем.

Соответственно, если мы хотим посчитать заряд в каком-то большем объеме, то нам надо посчитать интеграл по этому объему от функции распределения электронной плотности. Наглядный смысл функции такой: если значение функции большое, значит, там часто электрон "пролетает". Это означает, что это какие-то точки, находящиеся в окрестности центра атома. Если мы находимся далеко от центра атома, то туда электроны не "залетают", там значения электронной плотности будет маленьким. Поэтому, если каким-то образом нам удалось определить для объекта функцию распределения электронной плотности, мы можем эту функцию проинтерпретировать в терминах координат атомов, помещая атомы в места максимальных значений этой функции.

13

Как я уже сказал, распределение электронной плотности в отдельном атоме может быть достаточно сложным. Однако, в современном рентгеноструктурном анализе обычно используется более простая модель, в которой предполагается, что распределение электронов в окрестности атома можно описать сферически симметричной функцией. Для такого сферически симметричного распределения плотность зависит только от расстояния до центра. Здесь приведен характерный вид такой зависимости. Это распределение электронной плотности для атома серы. Видно, что это колоколообразная кривая, где значения электронной плотности убывают по мере удаления от центра.

14

Если мы посмотрим распределение электронной плотности для других атомов, то увидим кривые примерно такого вида.

15

На этом рисунке просто изменен масштаб. Здесь я хочу обратить внимание на то, что электронная плотность в атоме водорода существенно ниже, чем электронная плотность для остальных атомов, поэтому определение положения атомов водорода представляет проблему для рентгеноструктурного анализа. Только в последнее время с совершенствованием техники в некоторых работах удается определять более или менее надежно положение атомов водорода. Как правило, рентгеноструктурное исследование ставит своей целью определение позиций всех неводородных атомов.

16

Такой колоколообразный вид этой кривой наводит на мысль, что ее можно достаточно хорошо описать, например, гауссовой функцией.

17

Эту же функцию можно записать в другом виде, расставив коэффициенты в несколько более сложном виде. Этому есть свои причины. Я скажу о них позже. Но, по большому счету, это тот же вид записи функции.

18

Но оказывается, что одна такая гауссова кривая все-таки недостаточно хорошо передает форму этого распределения электронной плотности в отдельном атоме. Поэтому, как правило, в рентгеноструктурном анализе используется более сложная форма описания этой кривой. Это так называемая пятигауссовая модель, когда распределение электронной плотности в отдельном атоме

моделируется в виде суммы пяти таких гауссовых с немножко разными параметрами - шириной и высотой.

19

На сегодняшний день считается, что такая пятигауссовая модель достаточно хорошо описывает распределение электронной плотности в атоме. Соответственно, эти десять коэффициентов - они свои для каждого типа атомов. Эти значения сведены в специальные таблицы, откуда они и берутся для практической работы.

20

Итак, суммируя эту часть, я хочу сделать такую общую сводку:

- распределение электронной плотности можно представить себе как сумму "сферических" атомов;
- распределение электронов в отдельном атоме мы предполагаем заранее известным; оно приближенно задается суммой пяти гауссовых функций, и эти функции табулированы;
- рентгеновские лучи взаимодействуют с электронами атомов в исследуемом образце;
- изучение интенсивностей рентгеновских лучей, расходящихся от образца, позволяет сделать выводы о распределении электронов в изучаемом объекте.
- после нахождения распределения электронов в изучаемом образце можно его проинтерпретировать в терминах координат атомов, поскольку максимальные значения электронной плотности соответствуют центрам атомов.

21

Прежде чем говорить о способах нахождения распределения электронной плотности, я хочу заглянуть в конец и обсудить вопрос о том, а как эту функцию трех переменных можно увидеть? Каким образом можно продемонстрировать, как устроено это распределение?

Если у нас функция зависит только от одного переменного (например, если распределение сферически симметрично), то самым наглядным способом является график. Здесь приведены графики распределения электронной плотности в отдельных типах атомов.

22

Задача становится более сложной, если у нас функция двух переменных. В этом случае, если функция достаточно простая, ее опять-таки можно изобразить в виде графика, но здесь уже график функции будет двумерной поверхностью. Используя средства компьютерной графики, мы можем эту поверхность изобразить в пространстве более или менее удачно. И тем самым передать информацию о том, как устроена эта функция.

Второй способ передать информацию о том, как устроена функция двух переменных - это "топографические карты" или, более формально, линии уровня этой функции. Здесь идея такая: мы рассматриваем все точки, для которых функция имеет одно и то же значение. Эти точки лежат на некоторых линиях. И мы рисуем линии, отвечающие разным значениям электронной плотности. Перебирая эти значения с некоторым шагом, мы получаем семейство линий, которое показывает, как распределены значения этой функции в пространстве. Ну, вот на этой карте мы видим, что здесь имеется вытянутый холм в середине и имеются два таких холма по бокам, но уже меньшей высоты, чем центральный. Естественно, для того, чтобы представить полную

информацию о функции, нужно показать линии уровня, соответствующие всему спектру значений функции. На этой картинке мы показали только линии уровня, отвечающие большим значениям функции, и не показали линии, отвечающие минимумам этой функции, чтобы картинка была более ясной. Это типичная ситуация для рентгеноструктурного анализа. Поскольку нас интересуют значения максимальной электронной плотности (именно они дают положения атомов), то нам, как правило, менее интересны низкие значения. Поэтому на рентгеновских картах обычно показывают только области, отвечающие высоким значениям электронной плотности.

23

А что делать, если наша функция зависит от трех переменных? Мы уже не можем здесь воспользоваться графиком этой функции, поскольку графиком будет трехмерная поверхность в четырехмерном пространстве. А рисовать в четырехмерном пространстве - это занятие сложное. Человеческий мозг плохо приспособлен для четырехмерных картинок. Поэтому здесь снова возникают два подхода. Первый. Функция у нас трех переменных. Но если зафиксировать какую-то плоскость в трехмерном пространстве, то в этой плоскости наша функция уже будет функцией двух переменных, и ее можно изобразить системой линий уровня для этой плоскости. Здесь показано для пептидной группы распределение электронной плотности в плоскости, примерно проходящей через центры атомов.

24

Для того, чтобы получить полностью информацию о том, как устроено трехмерное распределение электронной плотности, нам надо подвигать эту плоскость, скажем, вдоль оси Z , и для каждого положения такой плоскости нарисовать, как устроено соответствующее двумерное распределение электронной плотности. То есть, информация о трехмерной функции передается как набор двумерных сечений функции распределения электронной плотности. Ну, здесь вот для пептидной группы приведен набор таких сечений. Мы начинаем двигаться снизу. Постепенно увеличивая координату Z , мы получаем эти "срезы" функции распределения электронной плотности.

25

Второй способ представления информации о трехмерной функции - это поверхности уровня. Если у нас есть функция трех переменных, мы можем сказать, что нас интересует та область, в которой значения функции превосходит некоторое критическое значение. Это будет некоторая область в трехмерном пространстве. И мы можем, используя разные средства графики, попытаться изобразить эту трехмерную область, например, на экране дисплея. Здесь приведено такое изображение. Естественно, такое изображение зависит от того, как выбран этот критический уровень. И, меняя это значение критического уровня, мы будем получать разные поверхности уровня и, соответственно, разные изображения этой поверхности.

Здесь для пептидной группы, если мы берем достаточно низкое значение, мы видим такую область. По мере роста критического уровня она сужается. И если мы берем совсем высокие значения, то мы видим только вот эти шарики, отвечающие центрам атомов, где находится самая высокая электронная плотность. В принципе, мы могли бы тоже, как с топографическими картами, сказать, что мы хотим видеть поверхности уровня, одновременно отвечающие разным значениям. Но, поскольку для белков такие поверхности устроены

достаточно сложно, то даже поверхность уровня, отвечающая одному значению - это достаточно сложный объект, с которым тяжело разбираться. А попытка рассматривать сразу несколько поверхностей уровней, как правило, не удается, потому что вообще становится ничего не понятно.

26

Итак, распределение электронной плотности можно проинтерпретировать в терминах координат атомов, поскольку локальные максимумы электронной плотности отвечают центрам атомов. Поэтому, если у нас есть хорошего качества, хорошо сосчитанное распределение электронной плотности, то, нарисовав поверхности, отвечающие самым высоким значениям функции электронной плотности, мы получаем вот эти шарики, отвечающие положениям центров атомов.

27

Вот на этой картинке приведен пример такой карты распределения электронной плотности, полученной в практическом исследовании для белка альдозредуктазы. Это карта очень высокого качества. Как правило, карты бывают существенно хуже.

28

На этой карте мы видим, что самые высокие значения электронной плотности - это такие шарики, которые отвечают координатам атомов. На нижнем рисунке - интерпретация этого распределения электронной плотности в терминах координат атомов.

29

Но на практике карты бывают, как правило, более низкого качества. Это типичный пример карты, с которой начинается интерпретация модели. Видно, что здесь ситуация гораздо хуже. На такой карте мы уже не видим отдельных атомов. Но на ней мы видим примерный ход полипептидной цепи и видим облака, отвечающие боковым группам.

30

Поскольку первичная последовательность белка обычно известна, то можно такую карту частично интерпретировать, построив по ней модель белка из стандартных кусков аминокислотных остатков.

31

Теперь я перехожу к так называемой кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей. Эта теория должна нам дать ответ на вопрос: что же происходит, когда падающий пучок рентгеновских лучей взаимодействует с исследуемым образцом, и что в результате мы измеряем? Как измеряемые величины связаны со структурой нашего объекта?

Эта теория решает так называемую прямую задачу теории рассеяния. Прямая задача ставится так: мы знаем, как устроен образец, то есть, знаем распределение электронной плотности в образце. Вопрос, который мы ставим - какова будет интенсивность лучей, рассеянный в разных направлениях.

32

Чтобы ответить на этот вопрос, я напомним элементарные сведения из теории электромагнитного поля. Они заключаются в следующем:

Мы говорим, что в пространстве существует электромагнитное поле, если, помещая в точку пространства заряд, мы обнаруживаем, что на этот заряд действует некоторая сила, которая пытается этот заряд сместить в сторону. Вектором напряженности электрического поля называется вектор, который показывает направление силы, действующей на заряд, помещенный в точку, а длина его подбирается так, чтобы сила, действующая на заряд равнялась произведению величины заряда на вектор напряженности электрического поля. Если мы определили такой вектор напряженности электрического поля во всех точках пространства, мы получаем некоторую функцию трех переменных, которая описывает стационарное электрическое поле.

33

Эта картина может меняться со временем. То есть сила, действующая на электрон, помещенный в какую-то точку, может во времени меняться. Чтобы передать это изменение, у нас вводится еще один параметр - время. Получающаяся функция трех пространственных и одной временной переменных называется электрическим полем.

Кроме электрического поля, существует еще связанное с ним магнитное поле. Но про него мы в этом курсе вообще говорить не будем, потому что та картина рассеяния рентгеновских лучей, которую мы будем обсуждать, с ним не связана.

34

Дальше нас будут интересовать специальные виды электрических полей - так называемые электромагнитные волны.

Одномерная электромагнитная волна

Простейшая модель - это одномерная электромагнитная волна, ее уравнение задается вот таким образом. В этом случае мы рассматриваем, скажем, распределение электромагнитного поля вдоль некоторого выделенного направления. Берем некоторое направление и вдоль него изучаем, как устроено электромагнитное поле. В этом случае у нас есть одна пространственная переменная - координата x вдоль этого направления, и вторая переменная - время t .

Синусоидальная электромагнитная волна имеет такую вот форму. Здесь стоит функция синус и разные еще величины. Мы сейчас обсудим разные компоненты этой электромагнитной волны.

Первое. У нас функция синус по своей абсолютной величине не превосходит единицы. Перед ней стоит множитель E_0 , который называется **амплитудой** волны. Амплитуда волны показывает размах колебаний.

35

Дальше у волны под аргументом функции синус есть компонента, которая зависит от этой пространственной координаты, которая называется пространственной компонентой. Зафиксируем какой-то момент времени t , например, момент $t=0$, и положим величину дельта тоже равной нулю. В таком случае у нас получается стационарное электрическое поле. График изменения напряженности электрического поля представляет собой стандартную синусоиду. Амплитуда волны - это размах этой синусоиды. А параметр λ , который здесь стоит, называется длиной волны, и он показывает расстояние между двумя соседними максимумами. Это такой мгновенный снимок

распределения напряженности электрического поля вдоль некоторого направления.

36

Дальше под аргументом здесь стоит временная компонента, которая показывает, как эта картина меняется со временем. Данная картинка у нас нарисована в момент времени $t=0$.

37

Если мы рассмотрим следующий момент времени, например, $t=1$, то, поскольку у нас под знаком функции появилось это смещение t , то вся эта картинка сдвинется. Здесь у нас показано распределение в момент времени 0 . А в момент времени t вся эта картинка сдвинется.

38-40

Теперь, если мы будем рассматривать последующие моменты времени, то у нас волна "побежит", в данном случае - вправо. Появляется такое вот движение этой волны. То есть в каждый момент времени наблюдается такое синусоидальное распределение напряженности. Но, когда мы смотрим во времени, эта картинка "бежит".

41

Теперь существует другой способ посмотреть на эту функцию двух переменных: наоборот, зафиксировать какую-то точку пространства, например, начало координат, и посмотреть, как меняется электромагнитное поле в этой точке пространства во времени. Изменение во времени тоже имеет синусоидальный характер. И, если мы посмотрим какую-нибудь точку, то сначала у нас нулевое поле, потом появляется сила, направленная в этом направлении, потом она сходит на нет; потом появляется сила, которая двигает электрон в другом направлении. И такие колебания во времени происходят, если мы находимся в фиксированной точке.

Теперь, если у нас уравнение записано в такой форме, то расстояние между соседними максимумами - это единица, деленная на v (ню), и v называется частотой волны. Если мы возьмем какой-то единичный промежуток времени, то такая электромагнитная волна совершает v колебаний в единицу времени.

42

Ну, и, наконец, четвертая нужная компонента в уравнении электромагнитной волны - это фаза. Опять-таки, если мы рассмотрим начальный момент времени, то, вообще говоря, не обязательно в начале координат мы будем иметь значение напряженности, равное нулю. Эта картинка может быть как-то сдвинута. Этот сдвиг задается фазой волны. Во всех дальнейших исследованиях нам важно не само значение фазы, а важна разность фаз двух электромагнитных волн. Потом мы увидим, что вот эта разность фаз имеет существенное значение.

Плоская электромагнитная волна

Это была одномерная картинка. Но мы работаем с трехмерным объектом. И, конечно, нас интересуют электромагнитные поля в трехмерном пространстве. В рамках этого курса мы будем заниматься специальным видом такого поля, которое формально хотя и является трехмерным, но на самом деле это одномерная волна. Чтобы записать уравнение этой волны, я напомним определение скалярного произведения.

43

Для двух векторов в пространстве скалярным произведением называется произведение модулей этих векторов на косинус угла между ними.

44-45

Геометрическая интерпретация скалярного произведения - это длина одного вектора, умноженная на проекцию на него другого вектора.

46

Поэтому, если мы поставим себе вопрос, для каких векторов \mathbf{a} их скалярное произведение с вектором \mathbf{b} постоянно, мы получим плоскость, перпендикулярную направлению \mathbf{b} ; в этой плоскости все скалярные произведения (\mathbf{a}, \mathbf{b}) будут одинаковы.

47

Поэтому, если мы возьмем какое-нибудь направление σ (сигма), задающееся вектором единичной длины, и посмотрим, где расположены точки, для которых скалярное произведение с вектором σ постоянно, то это будет некоторая плоскость, перпендикулярная направлению σ .

48-49

Плоская электромагнитная волна, распространяющаяся в направлении σ , задается вот таким уравнением. Здесь мы видим, что это та же самая функция, что у нас была и в одномерном случае, но здесь вместо одной координаты x у нас появилось скалярное произведение вектора \mathbf{r} на направление σ . Как мы уже говорили, это скалярное произведение одинаково в любой плоскости, перпендикулярной направлению σ . Поэтому трехмерное электромагнитное поле устроено так: если мы смотрим вдоль направления σ , то в этом направлении мы имеем одномерную синусоидальную волну, о которой мы говорили раньше. А если мы возьмем какую-то точку и посмотрим перпендикулярную этому направлению плоскость, то для всех точек этой плоскости картина одна и та же. Вот эта плоскость называется фронтом волны. И это называется плоской электромагнитной волной, волной с плоским фронтом.

В любой плоскости, перпендикулярной направлению (здесь нарисован аналог двумерной плоской волны) одинаковые значения расположены на прямых, перпендикулярных направлению σ . А в трехмерном пространстве это будут плоскости.

Сферическая электромагнитная волна

50

Еще один специальный вид электромагнитных полей, который появится в обсуждении - это сферические волны. Здесь ситуация похожая. То есть существенное изменение электромагнитного поля происходит только в одном направлении. И здесь оно имеет такой синусоидальный характер. А на всех сферах, окружающих точку, значение электромагнитного поля постоянно. Поэтому здесь в уравнении волны мы вместо аргумента x подставляем значение модуля вектора \mathbf{r} , и в результате получаем такое электромагнитное поле, которое в фиксированный момент времени постоянно на каждой сфере, меняется синусоидально вдоль этого направления ну, и, если мы включаем время, эти волны начинают разбегаться от центра.

Аналог плоских волн можно наблюдать на прямолинейном участке морского побережья. Это морские волны, накатывающиеся на берег, волны с плоским фронтом. А сферические волны - это если в воду бросаете камень, то от него начинают разбегаться круговые сферические волны. Это второй тип электромагнитных полей.

Рентгеновский пучок, в который мы помещаем исследуемый объект, представляет собой электромагнитную волну с длиной волны порядка одного ангстрема. Напоминаю, что расстояние между атомами - порядка полутора ангстрем.

51-54

Что происходит, когда рентгеновская волна попадает на электроны, входящие в состав исследуемого образца?

На каждый электрон действует сила, вызванная вектором напряженности электромагнитного поля. Теперь, если мы встанем в точку, где находится электрон, мы увидим, что эта сила меняется синусоидально во времени. То есть появляется сила, которая пытается тащить электрон в некотором направлении. Электрон начинает в этом направлении смещаться. Но потом сила меняет направление и начинает его двигать в другом направлении, и электрон начинает смещаться в другом направлении. Потом снова в первом. То есть понятно, что в результате электрон под воздействием такой периодически меняющейся силы начинает совершать колебания. Или, как говорят, осциллирует.

Что происходит, когда электрон начинает осциллировать? Поскольку электрон является зарядом, он сам из себя представляет электрическое поле, и это электрическое поле начинает тоже осциллировать. Осциллирующий электрон становится сам источником новой электромагнитной волны, в данном случае - сферической волны, которая начинает распространяться во всех направлениях. Это вторичная волна.

У нас была первичная волна - падающий рентгеновский пучок. Под ее воздействием электрон начал совершать колебания и сам стал "радиопередатчиком", начал излучать электромагнитную волну.

Все остальные электроны тоже начинают излучать электромагнитные волны. Вот эти суммарные электромагнитные волны складываются. И рассеяние этих вторичных волн и определяет картину рассеяния рентгеновских лучей.

То есть я повторяю: у нас сначала был пучок, который сначала шел в этом направлении. А теперь, когда он попал на образец, электроны образца стали источником новых волн, и возникло рассеянное излучение, которое теперь распространяется во всех направлениях. Поэтому мы можем помещать здесь какие-то детекторы и пытаться измерить интенсивность этого рассеянного излучения.

Это описание на качественном уровне.

55-56

Для того, чтобы получить более аккуратные уравнения, которые описывают эту картину, надо сделать 2 вещи:

Первое. Надо записать аккуратно, как движется электрон под воздействием падающей электромагнитной волны. Для того, чтобы это сделать, нужно решить соответствующие уравнения движения Ньютона. Я не буду выписывать все эти уравнения. Это за пределами нашего курса. Просто скажу, чтобы обозначить: для того, чтобы описать движение электрона под воздействием падающего

излучения, мы решаем уравнения Ньютона и получаем функцию, описывающую движение электрона.

Второе. Чтобы получить уравнение электромагнитной волны, которая возникает при движении этого электрона, надо решить другой тип уравнений - уравнения Максвелла, основные уравнения электродинамики, и решение этих уравнений позволяет получить уравнение рассеянной волны.

Я опускаю эту математическую часть и приведу только результат:

Если падающая волна имела такой математический вид (была плоская электромагнитная волна), то рассеянная волна будет сферическая электромагнитная волна. Фронт у этой волны будет сферический.

57

Теперь, если мы поместили наш детектор на достаточно большом расстоянии по сравнению с размерами объекта, то теперь, наблюдая, что происходит в точке, отвечающей этому детектору, мы можем заметить, что, хотя формально волна у нас сферическая, но на больших расстояниях фронт этой волны становится очень близок к плоскому. Поэтому для удобства дальнейших вычислений мы можем сделать такой трюк: если у нас это направление фиксировано, то, находясь в этой фиксированной точке, мы можем считать, что электромагнитная волна, которая приходит на детектор, тоже является плоской электромагнитной волной и записать ее уравнение в таком виде...

58

Я хочу подчеркнуть, что здесь мы совершили некоторую подмену. Волну, которая была на самом деле сферической, мы приблизили плоской волной. И это справедливо до тех пор, пока мы находимся на нашем детекторе в этой точке пространства. То есть на небольшом участке мы можем считать эту волну плоской, и описывать ее уравнением плоской волны, которое нам более удобно с математической точки зрения для дальнейшей работы.

Поэтому, если мы теперь это направление сигма зафиксировали, мы можем сказать так: если у нас падающая волна описывалась таким уравнением, то рассеянная волна будет описываться таким уравнением. Это плоская электромагнитная волна, распространяющаяся в направлении сигма. Но подчеркиваю, что это уравнение справедливо только на маленьком участке, на детекторе. Если мы возьмем другое направление, то для того направления у нас будет другое уравнение, поскольку будет другое значение вектора σ .

Рассеяние двумя электронами

59-62

Теперь посмотрим, что происходит, если в рассеянии участвует не один электрон, а два. Первый электрон для удобства мы поместим в начало координат. И уравнение рассеянной этим электроном волны дается такой синусоидой. Теперь рассмотрим, что происходит, когда вступает в действие второй электрон. Второй электрон тоже становится источником такой же синусоидальной волны, но:

- во-первых, заметим, что падающая электромагнитная волна приходит на второй электрон позже. И это запаздывание определяется вектором проекции вектора u , соединяющего центры электронов, на направление первичного пучка. И этот вектор, как мы говорили, дается скалярным произведением сигма нулевое на u , деленное на длину волны. То есть возникает запаздывание.

Теперь, когда мы переместились на детектор и смотрим, что происходит на детекторе, мы видим, что волна, рассеянная вторым электроном, приходит сюда раньше, чем волна, рассеянная первым электроном, поскольку здесь тоже по отношению к детектору эти электроны находятся на разном расстоянии.

Разница расстояний дается в данном случае вектором δ_2 , который есть проекция вектора u уже на направление σ . А теперь, если мы рассмотрим суммарный эффект от того, что сюда волна пришла позже, а сюда она пришла раньше - вот эта разница в фазе двух волн дается разностью двух векторов δ_1 и δ_2 .

Теперь я сюда подставляю эти δ_1 и δ_2 .

И мы получили, что эти две суммируемые электронных волны определяются вот этой разностью.

Что же происходит, если мы пытаемся суммировать две одинаковых синусоиды, но имеющие сдвиг по фазе. Результирующая картина будет разной в зависимости от того, какой этот фазовый сдвиг. Если фазовый сдвиг равен нулю, то это просто две синусоиды сложатся, и просто амплитуда удвоится. У нас тоже будет синусоида, но с удвоенной амплитудой.

Несложно показать, что на самом деле в любом случае сумма двух таких синусоид будет снова синусоида, но амплитуда этой синусоиды будет сильно зависеть от этого сдвига фаз. Если сдвиг фаз равен половине периода, одной второй, то у нас эти две синусоиды будут в противофазе, и их сложение даст 0. То есть если δ_1 равно одной второй, то суммарной волны вообще не будет, у нас будет нулевая интенсивность амплитуды рассеянной волны. Ну, а соответственно, если δ_1 принимает промежуточные значения, то у нас и амплитуда рассеянной волны тоже будет принимать промежуточные значения между удвоенной и нулевой.

63

Поэтому мы получили важный вывод. Амплитуда рассеянной волны зависит от взаимного расположения рассеивающих электронов. А поэтому это уже дает возможность извлекать информацию о взаимном расположении электронов, изучая интенсивности рассеяние электромагнитных лучей в разных направлениях.

64

Если мы померили интенсивность рассеяния в каком-то направлении и получили, что она большая, то, значит, сдвиг фазы близок к нулю и, соответственно, вектор u должен быть таким, чтобы его скалярное произведение вот на этот вектор, на эту разность, было нулевым или целым. Если она соответственно маленькая, то сдвиг фаз должен быть близок к одной второй.

Поэтому, в принципе, мы уже могли бы использовать так называемый метод проб и ошибок для определения взаимного расположения этих электронов.

Метод проб и ошибок

65

Метод заключается в том, что мы выдвигаем некоторую гипотезу о том, как утроен вектор u , показывающий взаимное расположение двух электронов. Теперь, зафиксировав u , для разных направлений рассеяния мы можем рассчитать отвечающий этому направлению сдвиг фазы и посчитать ожидаемую амплитуду рассеянной в этом направлении волны (для каждого из возможных

направлений рассеяния). После этого мы можем экспериментально померить соответствующие амплитуды рассеяния в эксперименте и сравнить предсказанные значения с экспериментом. Если у нас получилось хорошее соответствие предсказанных значений эксперименту, то, значит, мы угадали, эти электроны так и расположены друг относительно друга. А если плохое соответствие - то значит, мы не угадали, нужно придумать какую-то более правильную гипотезу о том, как эти два электрона расположены друг относительно друга.

Мы пришли к очень важному выводу - амплитуда рассеянной волны чувствительна к тому, как расположены электроны друг относительно друга. Эта чувствительность и является основой того, что рентгеноструктурный эксперимент дает какую-то информацию о структуре исследуемого вещества.

Экспериментальные данные

66

Теперь я должен произнести несколько слов относительно того, как описывается эта экспериментальная картина. У нас есть падающий пучок рентгеновских лучей, который имеет свою длину волны λ , и он задается единичным вектором σ нулевое, который показывает направление этого пучка. Дальше мы в некотором направлении помещаем детектор, и направление на этот детектор задается также единичным вектором σ' - это направление детектора. Разность этих направлений - $\sigma - \sigma'$ нулевое, деленное на длину волны рассеянного излучения, называется вектором рассеяния. Это очень важная характеристика, которая в дальнейшем фигурирует во всех уравнениях, которые связаны с теорией рассеяния.

Теперь вводится такое понятие, как отражающая плоскость. Это плоскость, которая находится под равными углами к падающему и отраженному пучкам. Это понятие возникло исторически, потому что одно из первых объяснений теории рассеяния рентгеновского излучения звучало так: рентгеновские лучи отражаются в некоторой вымышленной зеркальной плоскости. Отражаются по законам оптики: угол падения равен углу отражения. Поэтому, если мы имеем направление падающего пучка и направление на детектор, мы проводим такую плоскость, и это называется отражающей плоскостью. Вот этот угол между отражающей плоскостью и падающим и отраженным пучком называется углом рассеяния. То есть на самом деле мы видим, что угол между направлением падающего пучка и направлением на детектор - это 2θ , где θ - угол рассеяния. Дальше говорят: когда эти углы маленькие, то есть направление на детектор близко к направлению падающего пучка, то говорят о рассеянии под малыми углами, а когда этот угол большой, то говорят о рассеянии под большими углами.

67

Здесь приведена фотография реальной экспериментальной установки. Справа подходит канал синхротронного ускорителя, который дает этот пучок. Здесь помещается кристалл и всякие сопутствующие охлаждающие устройства. А здесь располагается детектор, который, собственно говоря, и регистрирует рассеянные лучи. А здесь написано предупреждение для экспериментаторов, чтобы они бережно обращались с этим устройством, поскольку оно стоит полмиллиона евро.

Рассеяние несколькими электронами

68-70

А теперь мы снова вернемся к рассеянию и посмотрим, что получается, когда у нас не два электрона, а несколько.

Один электрон дает такое уравнение рассеянной волны, второй дает такое же, но здесь появляется сдвиг, который записывается как скалярное произведение вектора рассеяния на вектор, связывающий эти координаты. Если у нас есть третий электрон, то он дает свою рассеянную волну. Четвертый дает свою рассеянную волну. И в результате у нас получается сумма таких волн, рассеянных электронами.

71

Очень важным фактом является то, что на самом деле сумма этих многих синусов сама является синусоидальной волной, которую можно записать вот в таком виде. Это достаточно простое преобразование, но я не буду его приводить, чтобы не загромождать изложение формулами. Для нас важен финальный вывод: можно преобразовать вот эту сумму и написать ее в виде одной новой синусоидальной волны, в которой появляется дополнительный множитель у амплитуды и появляется некоторый суммарный сдвиг фазы. Вот эти множитель при амплитуде и сдвиг фазы называются модулем и фазой структурного фактора, и они в себя аккумулируют всю информацию о структуре изучаемого объекта. То есть мы видим, что уравнение рассеянной волны, по сути, совпадает с уравнением падающей волны, но появляются добавки, которые связаны с особенностью структуры рассеивающего объекта. Поэтому эта пара называется структурным фактором, и здесь выписаны уравнения, как определяются модуль и фаза структурного фактора по координатам атомов.

72

Мы видим, что существует непосредственная связь: зная координаты рассеивающих электронов, мы можем выписать модули и фазы структурного фактора. Здесь написано, как модули и фазы структурного фактора непосредственно выражаются через эти суммы синусов и косинусов.

73-74

В эксперименте мы в состоянии измерить интенсивность рассеянной волны. Эта интенсивность пропорциональна квадрату модуля структурного фактора. То есть то, что мы измеряем в эксперименте, связано таким вот образом с координатами рассеивающих атомов.

75

Как я уже говорил, электроны - они не фиксированы в какой-то точке. Имеется некоторое облако электронной плотности. Что происходит, если мы имеем дело не точечные электроны, закрепленные в каких-то точках, а имеем некоторое распределение электронной плотности в пространстве? В таком случае мы поступаем так, как обычно поступают в интегральном исчисления. Мы берем некоторую точку пространства, берем маленький объем. Тогда у нас средний по времени объем в этой точке пространства - $\rho \cdot \Delta V$. Ну, и мы считаем, что пространство разбито на маленькие кубики, в каждом из них находится заряд вот такой величины, и поэтому вместо суммы по всем электронам у нас возникают интегралы по пространству от этих косинусов и синусов. Но здесь,

поскольку в каждой точке пространства у нас находится уже не один электрон, а заряд $\rho \cdot \Delta V$, здесь у нас появляется вот этот множитель $\rho \cdot \Delta V$.

Прямая и обратная задачи

76

Теперь с общих позиций мы можем сказать, что при рассеянии рентгеновских лучей на объекте интенсивность рассеянных лучей связана с распределением электронной плотности в образце и дается вот такой формулой. То есть мы научились решать прямую задачу теории рассеяния - если мы знаем распределение электронной плотности в объекте, то мы знаем, как рассчитать интенсивность лучей, рассеянных в различных направлениях.

Теперь что на самом деле нам надо научиться делать - нам надо научиться решать обратную задачу, потому что нас на самом деле интересует вещь обратная: мы знаем из эксперимента интенсивности рассеяния в разных направлениях, а хотим восстановить распределение электронной плотности. Вот это восстановление электронной плотности по интенсивностям рассеяния называется расшифровкой структуры, и мы об этом позже будем говорить.

77

Пока я хочу остановиться на некотором более частном случае. Как устроена интенсивность рассеяния объектов, состоящих из атомов? Ну, для начала начнем с одного атома. Если мы имеем один атом, находящийся в начале координат, то распределение электронной плотности в нем, как мы говорили, аппроксимируется суммой нескольких гауссовых функций. Ну, давайте для начала рассмотрим одну гауссову функцию. И мы можем вычислить модуль структурного фактора вот по этой формуле, подставив сюда распределение электронной плотности в атоме.

78

Эти интегралы на самом деле можно аналитически вычислить, и оказывается, что в таком случае распределение - модуль структурного фактора - является сферически симметричной функцией, зависит только от длины вектора \mathbf{s} и является тоже гауссовой функцией. Функция $F(\mathbf{s})$ называется фактором атомного рассеяния, или атомным форм-фактором, и она показывает, как меняется с ростом длины вектора \mathbf{s} модуль структурного фактора при рассеянии одним атомом. Здесь уже коэффициенты при гауссовой функции становятся совсем простым. Это объясняет почему в формуле для плотности коэффициенты были взяты в странном виде того, почему здесь коэффициенты записаны в таком сложном виде - они становятся простыми, когда мы переходим к факторам атомного рассеяния.

Как мы говорили, на самом деле распределение электронной плотности в атоме моделируется суммой нескольких гауссовых функций. Ну, и, соответственно, форм-фактор атомного рассеяния будет тоже моделироваться суммой нескольких (пяти) гауссовых функций, и коэффициенты этих форм-факторов атомного рассеяния известны.

79

Теперь, что у нас происходит, если мы рассматриваем рассеяние суммой атомов. Здесь у нас ситуация получается промежуточная между рассеянием непрерывной функции и рассеянием точечных электронов. С одной стороны, рассеяние отдельных атомов определяется фактором атомного рассеяния $F(\mathbf{s})$.

Ну, а кроме того, атомы у нас находятся не вначале координат, а находятся в точках с координатами \mathbf{r} . Поэтому здесь при вычислении структурного фактора происходит опять-таки суммирование косинусов и синусов, но только теперь, поскольку у нас идет рассеяние не отдельными электронами, а атомами, то информация о структуре атома здесь представляется в виде множителя - вот этого фактора атомного рассеяния. То есть, зная координаты атомов и зная факторы рассеяния для отдельных атомов, мы можем посчитать модуль и фазу структурного фактора, воспользовавшись такими формулами.

80

Здесь дана вот эта суммарная таблица, как вычисляются модули и фазы структурного фактора: $F\cos\varphi$ и $F\sin\varphi$ такими вот формулами. Если мы рассматриваем просто электрон в точках u_1, u_2 и так далее, то это просто суммирование косинусов и суммирование синусов. Если мы рассматриваем непрерывное распределение электронной плотности, то это интегралы от косинусов и синусов с весом $\rho(\mathbf{r})\Delta V$. Ну, и если мы рассматриваем атомы, для которых мы знаем форм-факторы и координаты $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, то здесь будет суммирование синусов, но здесь будут в качестве весов выступать эти факторы атомного рассеяния.

81

Теперь, разработав эту кинематическую теорию рассеяния и получив формулы, для расчета интенсивностей рассеянных лучей по известной электронной плотности, мы можем поставить, в принципе, задачу определения структуры как некоторую математическую задачу минимизации. Что мы имеем? Мы имеем экспериментально определенные значения модулей структурных факторов для различных направлений векторов рассеяния - s_1, s_2, s_3 и так далее. Теперь, если у нас есть какая-то гипотетическая (пробная) структура, какие-то гипотетические координаты атомов, то для каждого такого набора координат мы умеем рассчитывать теоретические значения модулей, то есть значения модулей, которые должны были бы быть, если бы атомы действительно располагались в этих позициях. Ну, и теперь мы для этих рассчитанных модулей можем сравнить их с экспериментальными, например, посчитав сумму квадратов отклонений рассчитанных по модели модулей от экспериментальных, и мы можем теперь сказать, что мы хотим подобрать координаты атомов структуры так, чтобы это расхождение минимизировать.

82-83

Но, к сожалению, в таком виде эта задача является чересчур сложной даже для современных компьютеров и средств вычислительной математики, и прямо в таком виде решить эту задачу не удастся. Проблема заключается в том, что число неизвестных значений координат может достигать сотен тысяч, а число экспериментальных наблюдений - миллионов. И вот эта функция получается устроенной слишком сложно. Такие задачи на минимизацию на сегодняшний день вычислительная математика решать не умеет.

Однако современные средства вычислительной математики и компьютеры позволяют решать более частную задачу. Если координаты этих атомов удалось как-то определить приближенно, более или менее точно, то мы дальше можем уже автоматически уточнить эти значения, минимизируя вот эту функцию. То есть мы умеем решать эту задачу минимизации, но только умеем ее решать локально. Если у нас есть уже достаточно точные значения координат, мы можем их сделать совершенно точными, автоматически запустив

соответствующую программу на компьютере - программу минимизации. Но для того, чтобы это сработало, мы должны откуда-то эти предварительные координаты атомов взять. О чем мы дальше и будем говорить.