

1. Вопросы по лекции

2. На каком физическом явлении основан метод РСА - рентгеноструктурный анализ?

а. Падающее на образец плоское рентгеновское излучение из источника приводит к колебанию электронов с той же частотой.

б. Колеблющиеся заряженные частицы – электроны – вызывают вторичную электромагнитную волну, распространяющуюся во все стороны (сферическую ЭМ волну)

с. ЭМ волны от всех электронов образца детектируются в каждом пикселе детектора. Из-за интерференции, т.е. правил сложения волн с одинаковой частотой, волны обычно приходят в точку в разных фазах и потому гасят друг друга, т.е. дают белый шум. В случае кристалла в отдельных точка детектора сигнал детектируется из-за того, что волны от разных ячеек кристалла приходят в одинаковой фазе и их амплитуды складываются. Так как содержимое всех ячеек кристалла одинаковое, по определению кристалла, то происходит усиление сигнала от одной ячейки во столько раз, сколько ячеек в кристалле. В белковых кристаллах бывает порядка 10^{24} ячеек. Как вычислить: Если размер образца по одной оси 0.1 мм, а размер белка по той же оси 100\AA и ячейки такой же, то считайте число ячеек и не забудьте возвести в куб, т.к. осей три.

3. РСА эксперимент

а. схема-рисунок (см. презентацию, слайд 4 презентации ААл)

б. размер образца - кристалла белка

с. расстояние до детектора

д. детектируется рассеяние рентгеновского излучения электронами

е. что детектируется: интенсивность электромагнитной волны, рассеиваемой ВСЕМ образцом, в КАЖДОЙ точке детектора. Интенсивность сигнала равна квадрату амплитуды приходящей волны.

ф. Дополнительно образец вращается заданным образом и при этом сигнал детектируется и отслеживается «тот же сигнал». Получается много моментальных измерений одного сигнала при разных положениях образца!

г. результат – карта рассеяния, дифракционная картина (слайды 5 и 6)

1. Этапы РСА реконструкции 3D структуры биологических макромолекул, коротко (слайд 7).

1. кристаллизация
2. РСА эксперимент
3. оцифровка эксперимента
4. решение фазовой проблемы
5. ЭП в ячейке
6. черновая модель
7. оптимизация и проверка качества

2. Электроны и электронная плотность (ЭП).

Электрон – электрон это волна, описывается волновой функцией (квантовая химия)

В классическом приближении электроны в микрообъекте (молекуле белка) описываются функцией ЭП:

а. определение функции ЭП, аргументы и значение (слайд 8 - 11)

- i. аргумент = (x,y,z) – точка пространства
 - ii. значение – плотность электронов в точке (заряд/на см^3)
 - iii. $\rho(x,y,z)$ = среднее по времени от предела по $V \rightarrow 0$ (V объём окрестности точки (x,y,z)) от отношения заряда в окрестности к V .
- b. физические единицы измерения ЭП
 - c. графика зависимости электронной плотности от радиуса для одного атома (слайд 10)
 - d. единицы измерения ЭП для PDB-файла
 - e. способы изображения ЭП в компьютере (11)
 - f. восстановление координат атомов по функции электронной плотности для молекулы белка (11)

1. Теория рассеяния:

- a. одномерная электромагнитная волна (13)
- b. длина, частота, амплитуда
- c. связь длины волны и частоты
- d. изменение во времени в данной точке
- e. изменение в пространстве в данный момент времени
- f. сложение двух волн с одинаковой длиной волны; фазы (14)
- g. рассеяние волны электроном (15 – 20)
- h. рассеяние двумя электронами (21 – 22):
 - i. зависимость амплитуды от взаимного расположения электронов и направления рассеяния
 - ii. вектор рассеяния, каким он может быть (Г.М.Т. концов вектора рассеяния)