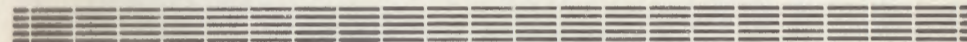


индекс 3624

Препринт ЕФН-996(46)-87

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
YEREVAN PHYSICS INSTITUTE



С.Г.ГЕВОРКЯН, Ц.М.АВАКЯН

ЛАУЭ ДИФФРАКЦИЯ НА КРИСТАЛЛАХ АМИНОКИСЛОТ



ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Ереванский физический институт
ЦНИИатоминформ
ЕРЕВАН — 1987

Նախնատիպ EՊՄ-996(46)-87

Ս.Գ. ԳԵՎՈՐԳԵԱՆ, Ծ.Մ. ԱՎԱԳՑԱՆ

ԼԱՌԻԷ ԴԻՓՐԱԿՑԻԱՆ ԱՄԻՆԱԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Սինքրոտրոնային ճառագայթների կիրառմամբ քննարկվում են Լաուէի մեթոդի տարբեր առանձնահատկությունները: Բերվում են Երևանի օղակա-
ձև արագացուցիչի սինքրոտրոնային ճառագայթման միջոցով ստացված
Լաուէզրամներ որոշ ամինաթթուներից՝ Լեյցին, Իզոլեյցին, արգինին:

Երևանի Փիզիկայի ինստիտուտ

Երևան 1987

Preprint EՊՄ-996(46)-87

S.G. GEVORKIAN, Ts.M. AVAKIAN

LAUE DIFFRACTION ON AMINO ACID CRYSTALS

Different aspects of the Laue method are discussed using
synchrotron radiation (SR). The results obtained by means of
the Yerevan cyclotron SR from amino acid (leucine, isoleucine,
arginine) monocrystals are presented.

Yerevan Physics Institute

Yerevan 1987

С.Г.ГЕВОРКЯН, Ц.М.АВАКЯН

ЛАУЭ ДИФФРАКЦИЯ НА КРИСТАЛЛАХ АМИНОКИСЛОТ

Обсуждаются разные аспекты метода Лауэ с использованием синхротронного излучения (СИ). Приводятся данные, полученные с помощью СИ Ереванского кольцевого ускорителя от монокристалла аминокислот: лейцина, изолейцина, аргинина.

Ереванский физический институт

Ереван 1987

Принципы метода Лауэ хорошо изучены [1-3]. Когда полихроматическое излучение падает на неподвижный кристалл, все рефлексы, которые лежат между ограничивающими сферами Эвальда радиусов $\frac{1}{\lambda_{\min}}$ и $\frac{1}{\lambda_{\max}}$ образуются некоторыми волнами первичного пучка. Можно показать, что число образованных рефлексов N_L дается уравнением

$$N_L = \frac{\pi d^{*4} (\lambda_{\max} - \lambda_{\min})}{4 V^*}, \quad (1)$$

где d^* - ограничивающая разрешающая способность кристалла, ($d^* < \frac{2}{\lambda_{\max}}$) и V^* - объем ячейки обратной решетки.

Все рефлексы от неподвижного кристалла регистрируются как интегральные интенсивности, в которых интегрирование проводится по всем длинам волн. Это отличается от интегрирования по всем длинам, что принимается при тех методах, которые используют монохроматическое излучение, и которые сопровождаются колебанием или поворотом образца во время экспозиции. Интегральная интенсивность J_L К-го лауэвского рефлекса дается

$$J_1 \sim J_0(\lambda) V_c^{*2} T(\lambda, \vec{z}) P(\lambda, \vec{z}) S(\lambda, \vec{z}) \lambda^4 |F(\vec{k}, \lambda)|^2, \quad (2)$$

где $J_0(\lambda)$ - интенсивность первичного пучка между λ и $\lambda + d\lambda$, V_c - объем облучаемой части кристалла, $F(\vec{k}, \lambda)$ - структурный фактор рефлекса \vec{k} , T - фактор искажения образца.

Также можно показать, что каждый рефлекс отбирается от нейтрального падающего спектра в области спектра $\Delta\lambda$

$$\Delta\lambda' = \lambda \cot \theta \Delta\Phi, \quad (3)$$

где λ - средняя длина волны, отобранная данным рефлексом, θ - угол Брегга и $\Delta\Phi$ - мозаичность кристалла.

Характерным свойством лауэграмм белковых кристаллов является то, что рефлексы Лауэ могут быть переведены в длинные, узкие радиальные прямые. Для кристалла мозаичности $\Delta\Phi$ радиальная длина Δy рефлексов Лауэ пятен для точечного источника и точечного кристалла дается

$$\Delta y = 2R \sec^2 2\theta \Delta\Phi,$$

где R - расстояние кристалл - пленка.

Для метода Лауэ отмечаются четыре основных преимущества по отношению к другим методам, которые используют монохроматическое излучение.

1. Оптимальное использование естественного синхротронного излучения.

2. Уменьшение времени экспозиции. В случае полихроматического излучения и неподвижного кристалла все рефлексы между ли-

митирующими сферами Эвальда находятся в положении отражения.

3. Одновременная регистрация многих рефлексов.

4. Прямое получение интегральных интенсивностей от неподвижного кристалла.

Материалы и результаты

Были проведены первые эксперименты с использованием белого спектра синхротронного излучения Ереванского электронного кольцевого ускорителя (4,5 ГэВ, 2 мА). Полное синхротронное излучение отсекалось 600 $\mu\text{м}$ бериллиевыми окнами и 1,5-метровым слоем воздуха. Такая фильтрация приводит к тому, что падающий пучок имеет длины волн от $\sim 0,3 \text{ \AA}$ до $\sim 3,0 \text{ \AA}$. Расстояние источник-образец около 25 м. Использовалась пленка отечественного производства РМ-В. Время экспозиции около 5 мин.

Были получены лауэграммы монокристаллов аминокислот лейцина, изолейцина, аргинина (рисунок). Все кристаллы были выращены из водных растворов соответствующих аминокислот медленным выпариванием. Получаются монокристаллы размером от 20 $\mu\text{м}$ до 1 мм. Несмотря на круглую форму коллиматора размером 0,3 мм, рефлексы получались удлиненные.

Как говорилось выше, это следствие мозаичности кристалла. Мозаичность проявляется не только в удлинении, но и в расширении рефлексов. Оценки по формуле (3) приводят к результату $\Delta\Phi = 2 - 3$. На рентгенограммах четко видны зоны от кристаллических семейств в виде кругов, гипербол и линий.

Отдельного внимания заслуживает вопрос времен экспозиции. Например, на Корнельском синхротроне сness [4,5] от монокристаллов белков | получаются лауэграммы за 1-2 с при режиме работы 5,4 ГэВ и 30 мА. Это дает им возможность применить СИ для проведения динамических экспериментов. Вероятно, наши результаты тоже можно улучшить, используя чувствительные рентгеновские пленки (как в работах [2-4]) - Polazoid, SEA Reflex. Сильное различие во временах экспозиции, в основном, объясняется разной чувствительностью регистрирующей пленки.

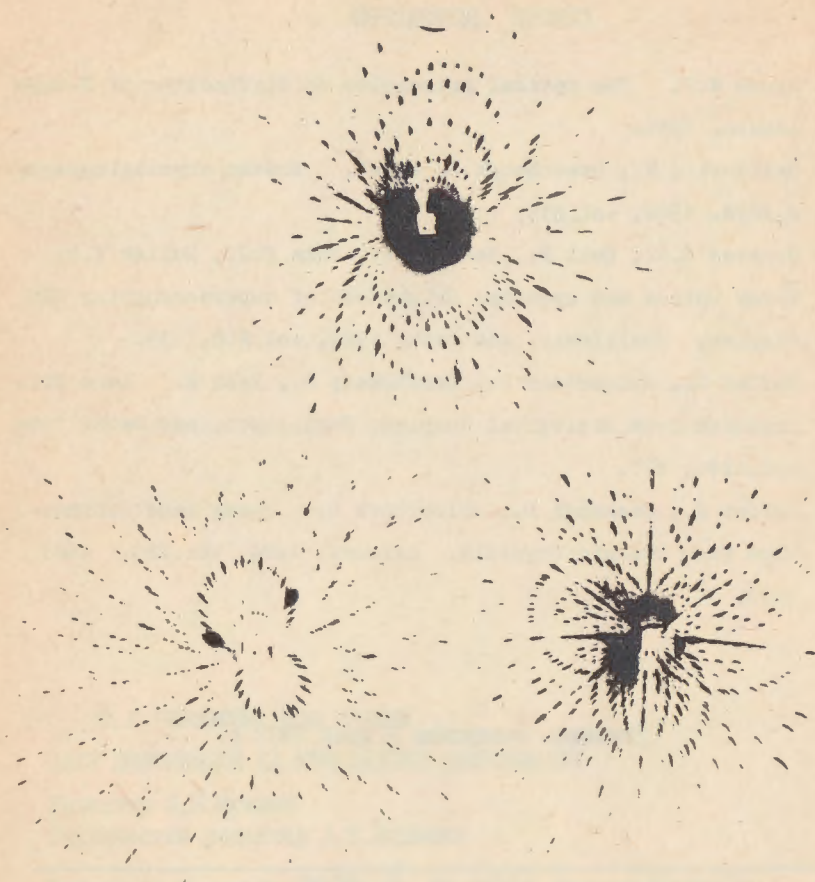


Рис. I Лауэграммы аминокислот:

- а) изолейцин
- б) лейцин
- в) аргинин

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. James R.W. The optical principles of diffraction of X-rays
London, 1950.
2. Halliwell J.R., Greenhough H. et al. Proton crystallography
J.Phys. 1982, vol.E15, 1363.
3. Greaves G.N., Holt R., Bennett K., Duke P.J., Suller V.P.
X-ray Optics and spectral Brightness of Superconducting SRS
Wiggler, Nucl.Instr. and Meth. 1983, vol.208, 139.
4. Moffat K., Bilderback D., Schildkamp D., Volz K. Laue Dif-
fraction from Biological Samples, Nucl.Instr. and Meth. 1986
vol.A246, 627.
5. Moffat K., Szebenyi D., Bilderback D. X-ray Laue Diffrac-
tion from Protein Crystals. Science, 1984, vol.223, 4643
1423.

Рукопись поступила 2 июня 1987 г.

С.Г.ГЕВОРКЯН, Ц.М.АВАКЯН

ЛАУЭ ДИФФРАКЦИЯ НА КРИСТАЛЛАХ АМИНОКИСЛОТ

Редактор Л.П.Мукаян

Технический редактор А.С.Абрамян

Подписано в печать 20/УШ-87 ВФ-06052 Формат 60x84/16
Офсетная печать. Уч.изд.л. I,0 Тираж 299 экз. Ц. 15 к.
Зак. тип. № 513 Индекс 3624

Отпечатано в Ереванском физическом институте
Ереван 36, Маркарян 2