

А. М. МАТЮШИН, Г. Н. САРКИСОВ, А. А. ВАЗИНА

## О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НЕМОНОХРОМАТИЧЕСКОГО МАГНИТНО-ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИХ МЕТОДАХ

(Представлено академиком Г. М. Франком 23 I 1974)

Использование магнитно-тормозного излучения начинает занимать одно из важных мест в рентгенографии биологических объектов. В рентгеноструктурных исследованиях белков для получения картины дифракции или индикатриссы диффузного рассеяния рентгеновских лучей от белковых образцов требуется значительное время, порядка нескольких часов. Это обусловлено слабой рассеивающей способностью белковых молекул в водном растворе или в сильно гидратированном (до 80%) кристалле белка. Большая инерционность рентгенографических методов не позволяет исследовать короткоживущие комплексы и динамику структурных трансформаций биологически важных макромолекул. В связи с этим особенно остро стоит вопрос о повышении интенсивности первичного излучения. В рентгенографических экспериментах обычно используется монохроматическое излучение ( $K_{\alpha}$  — линия характеристического спектра), поскольку теория рассеяния и дифракции рентгеновских лучей была построена и развивается для строго монохроматического излучения.

В последнее время в качестве источника рентгеновского излучения используются электронные ускорители (<sup>1</sup>). В этом случае интенсивность монохроматизованного излучения на два порядка выше, чем от лучших современных трубок (<sup>2</sup>). Так, Розенбаум и др. (<sup>2</sup>) получили дифракционную картину от мышцы на синхротроне Deuzy за 15 мин. Уменьшение времени экспозиции на два порядка существенно для биологических исследований. Однако для исследования короткоживущих комплексов и динамики структурных трансформаций требуется уменьшение времени экспозиций еще на несколько порядков. Сокращение времени экспозиции — слабое место в современном рентгенографическом эксперименте. Обычным способом сокращения времени экспозиции является увеличение мощности источника рентгеновского излучения и в этом направлении ведутся интенсивные технические разработки.

Мы предлагаем принципиально иной способ повышения интенсивности: использовать в эксперименте широкую спектральную полосу вместо узкой монохроматической линии. Значительное увеличение интенсивности в этом случае очевидно. Оценим количественно выигрыш в интенсивности на конкретном примере. Спектры синхротронного излучения ускорителя АРУС имеют коротковолновую границу  $\lambda_{\min} \approx 0,2 \text{ \AA}$ . Монохроматор вырезает из этого спектра узкую полосу  $\Delta\lambda \approx 0,005 \text{ \AA}$ . Обычно используемый диапазон длин волн в рентгенографии лежит в интервале 0,5 — 3,0 Å. Если использовать весь этот интервал, то выигрыш в интенсивности будет  $\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{K\Delta\lambda} \approx 3 \cdot 10^3$ , где  $K$  — отражающая способность кристалла-монохро-

матора  $1/7 - 1/8$ . Отсюда ясно, что использование широкой спектральной полосы дает выигрыш в интенсивности не менее чем на 3 порядка, а по сравнению с рентгеновской трубкой 5 порядков. Однако встает вопрос о

возможности извлечения информации из рентгенограмм, полученных на немонахроматическом излучении. В данной работе предлагается один из возможных путей решения этой задачи.

Пусть спектральное распределение с учетом поглощения в образце определяется функцией  $\varphi(\lambda) = e^{-\alpha\lambda^3} f(\lambda)$ , где  $f(\lambda)$  — спектр излучения источника,  $e^{-\alpha\lambda^3}$  — функция поглощения образца, тогда интенсивность рассеянного излучения от участка спектра  $\lambda + \Delta\lambda$  будет в общем случае  $I\left(h \cdot \frac{\lambda_{\min}}{\lambda}\right) \varphi(\lambda) d\lambda$ , где  $h = 4\pi \sin\theta / \lambda_{\min}$ ,  $\theta$  — угол рассеяния,  $I(h)$  — рас-

пределение интенсивности рассеяния, для строго монокроматического излучения с длиной волны  $\lambda_{\min}$ . Полная интенсивность имеет вид

$$I^*(h) = \int_{\lambda_{\min}}^{\infty} \varphi(\lambda) I\left(h \cdot \frac{\lambda_{\min}}{\lambda}\right) d\lambda. \quad (1)$$

Верхний предел интегрирования расширен до  $\infty$  из-за быстрого спада подынтегральной функции; функция  $\varphi(\lambda)$  определяется из дополнительного эксперимента. Нам нужно получить  $I(h)$  из измерений величины  $I^*(h)$ . Задача сильно упрощается для случая, когда вид функции  $I(h)$  известен.

Рассмотрим рассеяние рентгеновских лучей под малыми углами на непериодических неоднородностях электронной плотности. С помощью этого метода, в случае белковых растворов, можно определять размеры и форму белковой молекулы в растворе, а также следить за изменениями этих параметров при различных изменениях среды. Известно, что в области достаточно малых углов индикатрисса рассеяния гомогенными частицами произвольной формы хорошо аппроксимируется экспонентой <sup>(3)</sup>.

$$I(h) = \text{const } x \exp[-h^2 R_0^2 / 3], \quad (2)$$

где  $R_0$  — электронный радиус инерции частицы. Подставив (2) в (1), по-

лучим  $I^*(h) = \text{const } x \int_{\lambda_{\min}}^{\infty} \varphi(\lambda) x \exp[-h^2 R_0^2 \lambda_{\min}^2 / 3\lambda^2] \alpha \lambda$ .

Составляя выражение

$$\sum_{i \neq j} \left( \frac{I^*(h_i)}{I^*(h_j)} \frac{\int_{\lambda_{\min}}^{\infty} \varphi(\lambda) x \exp[-h_i^2 R_0^2 \lambda_{\min}^2 / 3\lambda^2] d\lambda}{\int_{\lambda_{\min}}^{\infty} \varphi(\lambda) x \exp[-h_j^2 R_0^2 \lambda_{\min}^2 / 3\lambda^2] d\lambda} \right)^2$$

и минимизируя по  $R_0^2$ , мы получим электронный радиус инерции частицы. На  $h_i$  и  $h_j$  накладывается единственное условие — они должны находиться в области экспоненциального приближения. Отношение  $I^*(h_i) / I^*(h_j)$  берется для того, чтобы избавиться от нормировки экспериментальных данных.

Для проверки вычислительной схемы нами был проделан следующий расчет на ЭВМ М-220М. Для прямоугольного спектра  $\lambda_{\min} = 0,5$  и  $\lambda_{\max} = 3,0$  с учетом поглощения в образце по формуле (1) были вычислены индикатриссы рассеяния для сферы и эллипсоида вращения. Подынтегральная функция  $I(h)$  задавалась точными выражениями, полученными Релеем <sup>(4)</sup>:

$$I_{\text{сф}}(h) = \Phi^2(hR) = \left[ 3 \frac{\sin hR - hR \cos hR}{h^3 R^3} \right]^2$$

для сферы радиуса  $R$ , и <sup>(5)</sup>

$$I_0(h) = \int_0^{\pi/2} \Phi^2(ha \sqrt{\cos^2 \theta + v^2 \sin^2 \theta}) \cos \theta d\theta$$

для эллипсоида вращения с осями  $2a$ ,  $2a$ ,  $2va$ . Из полученных данных, пользуясь разработанным алгоритмом, определялись радиусы инерции частиц, причем необходимое машинное время не превышает нескольких минут на ЭВМ типа М-220М.

Институт биологической физики  
Академии наук СССР  
Пущино-на-Оке

Поступило  
23 I 1974

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> Синхротронное излучение в исследовании твердых тел, сборн. статей, М., 1970.  
<sup>2</sup> *G. Rosenbaum, K. C. Holmes, J. Witz*, Nature, v. 230, 16 (1971). <sup>3</sup> *A. Guinier, G. Fournet*, Small Angle Scattering of X-Rays, N.Y., 1955. <sup>4</sup> *Lord Rayleigh*, Proc. Roy. Soc. (London), v. A90, 219 (1914). <sup>5</sup> *A. Guinier*, Ann. phys., v. 12, 161 (1939).