

И. С. ФЕДОРОВА

РАСЧЕТ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДИАМЕТРОВ ЦИЛИНДРОВ ПО ДАННЫМ РАССЕЯНИЯ КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

(Представлено академиком Г. М. Франком 4 IV 1975)

Достаточно широкий круг объектов биологического происхождения, например гладкие и скелетные мышцы, коллагеновые волокна, ориентированные фибриллярные белки и их агрегаты, при структурных исследованиях может быть аппроксимирован совокупностью параллельных круговых цилиндров. Существенная информация в ряде задач будет получена из функции распределения цилиндров по диаметрам $\rho(D)$. В настоящей работе предлагается метод расчета $\rho(D)$ по индикатрисе рассеяния для системы длинных невзаимодействующих цилиндров, удовлетворяющих приближению Релея — Дебая — Гауса (¹, ²). Это приближение выполняется практически для всех объектов в рентгеновском диапазоне и для большинства субклеточных оргanelл в видимой области спектра.

При падении плоской монохроматической волны перпендикулярно осям цилиндров картина рассеяния в обратном пространстве представляет собой слоевую линию. Можно показать (³), что распределение интенсивности $I(h)$ вдоль слоевой линии описывается преобразованием Ганкеля от корреляционной функции $\gamma(r)$ поперечного сечения системы цилиндров:

$$I(h) = \bar{s} \int_0^{\infty} \gamma(r) J_0(hr) r dr, \quad (1)$$

где $h = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}$, $\bar{s} = \frac{\pi}{4} \int_0^{\infty} \rho(D) D^2 dD$, $J_0(x)$ — функция Бесселя первого рода нулевого порядка.

Пользуясь методом, предложенным в (⁴), получим уравнение, связывающее $\gamma(r)$ с корреляционной функцией $\gamma_D(r)$ поперечного сечения изолированного цилиндра диаметра D ,

$$\gamma(r) = \frac{\pi}{4\bar{s}} \int_r^{\infty} D^2 \gamma_D(r) \rho(D) dD. \quad (2)$$

Определив аналитически $\gamma_D(r)$ из геометрических соображений (⁵), получим решение интегрального уравнения (2) в виде

$$\rho(D) = - \frac{2\bar{s}}{\pi D} \int_0^{\infty} \gamma'''(\sqrt{x^2 + D^2}) dx, \quad (3)$$

где штрихами обозначена третья производная по всему аргументу.

Получив $\gamma(r)$ обращением уравнения (1) и подставив в (3), получим окончательно

$$\rho(D) = - \frac{2}{\pi D} \int_0^{\infty} [I(h) h^3 - C] \Phi(hD) dh, \quad (4)$$

где

$$\Phi(a) = \int_0^{\infty} a J_1(a \sqrt{y^2+1}) dy + \int_0^{\infty} \frac{J_2(a \sqrt{y^2+1})}{a \sqrt{y^2+1}} dy.$$

Здесь $J_i(x)$ — функции Бесселя первого рода i -го порядка, C — константа, не зависящая от h и r .

Функция $\Phi(a)$ была протабулирована на ЭВМ. График ее представлен на рис. 1. Используя асимптотическое поведение функций Бесселя при

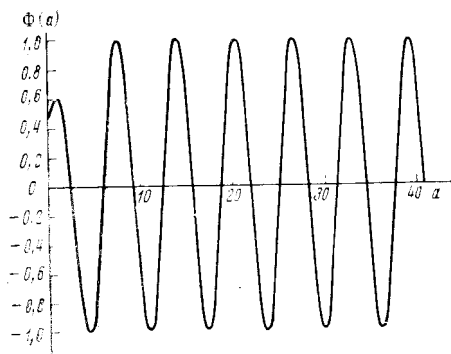


Рис. 1

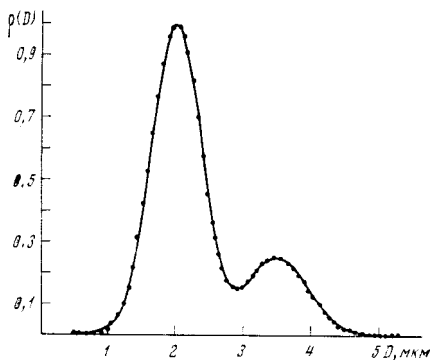


Рис. 2

Рис. 1. График функции $\Phi(a)$, входящей в уравнения (4) и (5). $\Phi(a)$ рассчитана на ЭВМ 220-М, график получен с помощью графопроектировщика «Вектор 1301», присоединенного к ЭВМ

Рис. 2. Результат восстановления на ЭВМ функции распределения $\rho(D)$ по формуле (4). $\lambda=0,475$ мкм, что соответствует длине волны гелий-неонового лазера в воде. Сплошная линия — задаваемое распределение $\rho_1(D)$, точки — рассчитанные по формуле (4) значения $\rho(D)$

больших значениях аргумента, можно разложить в ряд по степеням a :

$$\Phi(a) = \sin a + 1,5 \frac{\cos a}{a} + O\left(\frac{1}{a}\right).$$

В работе (6) показано, что для ориентированных цилиндров $I(h)$ при больших h уменьшается пропорционально h^{-3} и, следовательно, функция $I(h)h^3$ стремится к конечному пределу. Это позволяет ограничить верхний предел интегрирования в уравнении (4) некоторым конечным значением $h_{\max}$, выбрав $C = \lim_{h \rightarrow \infty} I(h)h^3$, что дает возможность вычислять $\rho(D)$ по данным реальных экспериментов.

Для проверки применимости предложенного метода были рассчитаны на ЭВМ 220-М индикатрисы рассеяния от ориентированных цилиндров с заданным распределением $\rho_1(D)$. Результат обработки на ЭВМ одной из таких индикатрис по формуле (4) представлен на рис. 2. Здесь $\rho_1(D) = \exp[-3,75(D-2)^2] + 1/4 \exp[-2,5(D-3,5)^2]$. Видно, что $\rho_1(D)$ и $\rho(D)$ хорошо совпадают и, следовательно, уравнение (4) может использоваться для нахождения функций распределения по диаметрам систем однородных ориентированных цилиндров.

Следует отметить, что предложенный метод может быть использован и при расчете распределения хаотически ориентированных цилиндров, так как в этом случае их интенсивность рассеяния $I^*(h)$, как известно (см., например, (3, 7, 8)), связана с $I(h)$ простым соотношением: $hI^*(h) = I(h)$ и, следовательно, в формуле (4) нужно $I(h)$ заменить на $hI^*(h)$ для неориентированных цилиндров. Это можно сделать, поскольку при выводе (4) во все уравнения h входит множителем, по которому не производится ни

интегрирования, ни дифференцирования. Таким образом, для полидисперсной системы хаотически ориентированных длинных однородных цилиндров имеем уравнение

$$\rho(D) = -\frac{2}{\pi D} \int_0^{\infty} [I(h)h^4 - C] \Phi(hD) dh. \quad (5)$$

Для обеспечения сходимости интеграла (5) следует взять $C = \lim_{h \rightarrow \infty} I(h)h^4$, так как $I(h)$ в этом случае при больших h спадает как h^{-4} . В заключение подчеркнем, что предложенный метод не требует априорных предположений о виде функции $\rho(D)$.

Автор выражает глубокую признательность В. Б. Емельянову и Б. А. Федорову за ценные дискуссии.

Институт биологической физики
Академии наук СССР
Пущино-на-Оке

Поступило
28 III 1975

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Г. ван де Хюлст, Рассеяние света малыми частицами, М., ИЛ, 1961. ² M. Kerker, The Scattering of Light. N. Y.—London, 1969. ³ G. Porod, Acta phys. Austriaca, v. 2, 255 (1948). ⁴ G. Letcher, P. W. Schmidt, J. Appl. Phys., v. 37, 649 (1966). ⁵ A. Guinier, G. Fournet, Small-angle Scattering of X-rays, N. Y., 1955. ⁶ R. Kirste, G. Porod, Koll. Zs. and Zs. Polymere, B. 184, 1, 1 (1962). ⁷ Б. А. Федоров, В. Г. Аleshin, Высокомолек. соед., т. 8, 1506 (1966). ⁸ B. A. Fedorov, Acta crystallogr., v. A27, 35 (1971).