

Кристаллография и рентгеноструктурный анализ биомолекул

К.ф.-м.н. Хасанов Салават Салимьянович

Целью дисциплины «Кристаллография и рентгеноструктурный анализ биомолекул» является ознакомление студентов с основными принципами кристаллографии и дифракционного и структурного анализа. Вводятся понятия современной кристаллографии, рассматриваются физические основы дифракции рентгеновских лучей, электронов и нейтронов в твердых телах. Излагаются основы структурного анализа.

Содержание курса:

МОДУЛЬ 1. Элементы кристаллографии.

1. Кристаллографическая решетка. Кристаллографические направления, плоскости. Индексы Миллера. Элементарная ячейка. Постоянные решетки.

2. Симметрические преобразования. Закрытые элементы симметрии. Сочетания элементов симметрии. Генерирование элементов симметрии. Кристаллографические точечные группы. Кристаллографические системы - сингонии. Матричное представление операций симметрии и точечных групп. Предельные группы Кюри.

3. Трансляционные группы. Правила выбора элементарной ячейки и 14 решеток Браве. Сопоставление понятий - кристаллическая решетка и атомная структура кристаллов.

4. Трансляция, как элемент симметрии. Винтовые оси, плоскости скользящего отражения. Матричное представление открытых элементов симметрии. Обозначения групп симметрии согласно международной системе.

5. Правильные системы точек, орбиты точек. Кратность общих и частных эквивалентных положений. Понятие о рациональном расположении и числе атомов в ячейке в соответствии с кратностью позиций. Полное описание известной структуры кристалла. Плотнейшие шаровые упаковки. Дефекты упаковки.

6. Кристаллические многогранники. Простые формы - орбиты плоскостей. Виды кристаллографических проекций - линейная, гномоническая, стереографическая, гномостереографическая. Сетка Вульфа. История кристаллографии.

7. Метрика обратного пространства. Обратная решетка и ее связь с характеристиками атомно-кристаллической решетки.

8. Икосаэдрическая симметрия. Фуллерены. Квазикристаллы.

МОДУЛЬ 2. Получение рентгеновских лучей и их взаимодействие с веществом.

9. Рентгеновские аппараты. Типы конструкций рентгеновских трубок. Спектр излучения рентгеновской трубки.

10. Синхротронное излучение: физические принципы получения СИ и применения в исследованиях и в технике.

11. Поглощение и рассеяние рентгеновских лучей в веществе. Линейные коэффициенты поглощения, зависимость от длины волны и атомного номера. Избирательное поглощение, фильтры.

12. Рассеяние рентгеновских лучей свободным электроном. Формула Томсона. Функция атомного рассеяния. Вывод общего выражения, понятие о методах расчета атомной амплитуды рассеяния.

13. Рассеяние рентгеновских лучей в газах, жидкостях и неупорядоченных твердых телах. Малоугловое рассеяние.

МОДУЛЬ 3. Дифракция рентгеновских лучей в кристалле.

14. Геометрическая теория дифракции на трехмерной решетке рассеивающих центров. Уравнение Вульфа-Брэгга в векторном и скалярном выражении. Построение Эвальда. Граница зоны Бриллюэна.

15. Основные дифракционные схемы в представлении обратной решетки: метод Лауэ, метод порошка, метод вращения (качания), методы широко расходящегося пучка, дифрактометрия поликристаллического объекта и монокристалла.

16. Интенсивность рентгеновских рефлексов. Рассеяние одной элементарной ячейкой. Структурная амплитуда, вывод общего выражения.

17. Интерференционная функция Лауэ. Задача о рассеянии малым кристаллом. Условия появления дифракционных максимумов. Форма и размеры узлов обратной решетки.

18. Переход к рабочим формулам интенсивности. Фактор интегральности. Тепловой фактор. Угловой фактор.

19. Анализ структурных амплитуд. Систематические погасания рентгеновских рефлексов, связанные с типом решетки Браве, с наличием винтовых осей, с наличием плоскостей скользящего отражения.

20. Синтез Фурье, как метод анализа атомной структуры кристаллов. Разложение электронной плотности в трехмерный ряд Фурье, структурные амплитуды как коэффициенты ряда. Обратная решетка, веса узлов, геометрический образ разложения Фурье.

21. Введение в динамическую теорию рассеяния рентгеновских лучей совершенными кристаллами.

МОДУЛЬ 4. Основные задачи, решаемые методами рентгеноструктурного анализа.

22. Этапы анализа неизвестной структуры. Последовательность применения различных схем съемки при определении сингонии, решетки Браве, точечной и пространственной групп, числа атомов в элементарной ячейке. Экспериментальные и расчетные методы определения координат атомов в ячейке. Метод проб и ошибок. Синтез Паттерсона. Прямые методы - синтез Фурье.

21. Исследование структурных превращений в кристаллах. Мартенситные превращения, структурные фазовые переходы второго рода, модулированные несоизмеримые структуры.

22. Экспериментальные задачи при структурной характеристике материалов: качественный и количественный рентгенфазовый анализ, размер зерен, микронапряжения и/или неоднородность по составу. Полнопрофильный анализ порошковых дифракционных спектров.

МОДУЛЬ 5. Основы электронографии и нейтронографии.

23. Электронография. Принцип и особенности метода дифракции быстрых электронов. Области применения. Основные задачи для дифракции медленных электронов.

24. Нейтронография. Ядерное рассеяние - принципы применения. Магнитное рассеяние, определение упорядочения магнитных моментов в структуре ферро- и антиферромагнетиков.

Основная литература:

1. Е.В. Чупрунов, А.Ф. Хохлов, М.А. Фадеев. Кристаллография. ФМ, М., 2000.
2. Современная кристаллография. Под редакцией Б. К. Вайнштейна, «Наука», М., 1981.
3. В.И. Иверонова, Г.П. Ревкевич. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М., МГУ, 1978.
4. В.Ш. Шехтман, Р.А. Диланян. Введение в рентгеновскую кристаллографию. Черноголовка, 2002.

Дополнительная литература:

1. М.П. Шаскольская. Кристаллография. «Высшая школа», М. 1984

2. А. Гинье. Рентгенография кристаллов. Физматиздат, М., 1961
3. Г. Б. Бокий, М. А. Порай-Кошиц. Рентгеноструктурный анализ. М., МГУ, 1954
4. М.П. Шаскольская. Кристаллография. «Высшая школа», М. 1984

Интернет-ресурсы:

<http://ncbi.nlm.nih.gov/pubmed>

<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

<http://www.uniprot.org/>