

Синтетические аморфные полимеры (например, каучук) дают, подобно жидкостям, дифракционные картины в виде совокупности концентрических колец (*диаграммы Дебая — Шерера*, рис. 5.6). Для такой картины, несравненно более бедной, чем лауэграмма кристалла, характерно наличие размытого кольца — *аморфного гало*, диаметр которого определяется преимущественными расстояниями между рассеивающими центрами. При растяжении аморфного полимера возникает текстура и вместо равномерных по интенсивности колец, как мы видим, наблюдаются более или менее протяженные дуги вблизи меридиана или экватора кольца. Сходные картины дают фибриллярные белки, а также надмолекулярные структуры типа мышечных волокон.

## § 5.2. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей растворами биополимеров

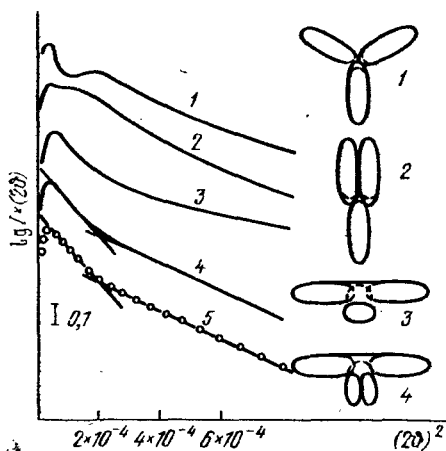
Диффузное рассеяние рентгеновских лучей растворами макромолекул дает прямую информацию о распределении рассеивающих объектов. Диффузное рассеяние есть суммарное рассеяние на беспорядочно расположенных отдельных макромолекулах, тем самым в нем усредняются интенсивности рассеянного света по всевозможным ориентациям макромолекулы. Чем больше углы рассеяния, тем меньше размеры деталей структуры, на которых происходит дифракция рентгеновских лучей. Под малыми углами рассеяния изучается общее строение макромолекул в растворе, а под средними и большими — особенности их внутреннего строения.

Теория малоугловой дифракции исходит из представлений, близких к применяемым в теории рассеяния света растворами макромолекул (с. 82). Теория позволяет связать наблюдаемую под теми или иными углами интенсивность рассеяния, т. е. его индикатрису с расстояниями между рассеивающими частицами. Для определения формы макромолекулы приходится задаться некоторыми о ней предположениями — представить макромолекулу в виде шара, эллипсоида или вытянутого цилиндра. Для таких, а также для других простых тел вычисляется индикатриса рассеяния как функция геометрических параметров макромолекулы. Так, для шара определяется электронный радиус инерции (электронный, так как рентгеновские лучи рассеиваются электронами). Для миоглобина этот радиус оказался равным 1,6 нм, что хорошо согласуется с размерами, определенными методом рентгеноструктурного анализа кристаллического миоглобина. Если рассеивающая система вытянута, то определяется электронный радиус инерции ее поперечного сечения. По индикатрисам рассеяния определены размеры, форма и молекулярные массы ряда биополимеров. Так, лизоцим представляется эквивалентным эллипсоидом вращения с размерами  $2,8 \times 2,8 \times 5,0$  нм<sup>3</sup>. Более детальная информация о форме однородных частиц получается из анализа кривых рассеяния под большими углами (от

нескольких градусов до  $\sim 25^\circ$  для  $\text{Cu } K\alpha$ -рентгеновских лучей). Рассеяние под большими углами характеризует детали размером от 4 до 0,5 нм.

На рис. 5.7 показаны теоретические индикатрисы рассеяния, вычисленные для различных моделей  $\gamma\text{G}_1$ -иммуноглобулина, и экспериментальные точки, которые ложатся на теоретическую

Рис. 5.7. Теоретические индикатрисы рассеяния для различных моделей иммуноглобулина (1—4) и экспериментальные точки (5)



кривую, отвечающую T-образной модели расположения доменов (см. с. 123). Эта модель получила в дальнейшем полное подтверждение в кристаллографических исследованиях.

При расчете рассеяния необходимо учитывать влияние растворителей на вид индикатрисы. Это влияние не специфично и растворитель может быть заменен на однородный и бесструктурный континуум, характеризуемый лишь одним параметром — эффективной электронной плотностью.

Метод состоит в сравнении экспериментальной индикатрисы с теоретической, вычисленной на основе кристаллографических данных. Не обнаружено заметных различий между структурами в кристалле и растворе (в области расстояний  $\geq 1$  нм) для рибонуклеазы и для комплексов рибонуклеазы и лизоцима с их ингибиторами. Однако экспериментальная кривая для лизоцима без ингибитора слегка отличается от теоретической в интервале расстояний  $\sim 2$  нм. Это различие можно интерпретировать как флуктуационное расширение зазора между двумя доменами белка. Заметные различия обнаружены на кривых для миоглобина, что, по-видимому, объясняется флуктуационными смещениями ее GH-шпильки относительно других частей молекулы. Установлены также существенные различия в структурных данных для кристаллического и растворенного лизоцима фага T4 и для других белков. Таким образом, по крайней мере некоторые белки в растворе характеризуются смещениями доменов, из которых построены глобулы.