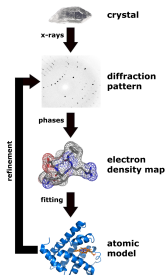


Makromolekulární krystalografie - ÚVOD

Metody biofyzikální chemie - seminář (C5856)

Jan Novotný
novotnyjan@mail.muni.cz

26. září 2016



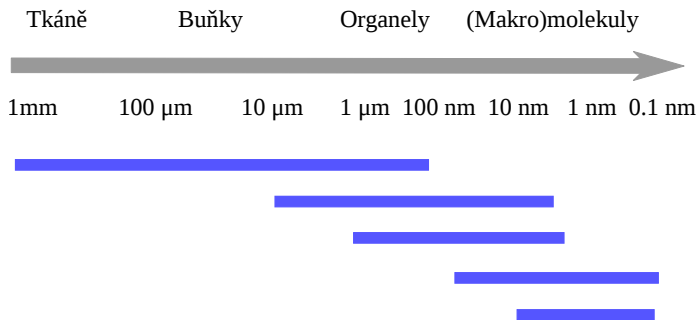
Základní fyzikálně-chemické poznatky

- Napište vztah pro příčnou vlnu elektromagnetické záření šířícího se ve směru osy z , o úhlové frekvenci ω a počáteční fázi ϕ_0 .
- Jaká je souvislost mezi intenzitou(amplitudou) elektrického pole a intenzitou odpovídajícího ELMAG záření.
- Do 2D mřížky zakreslete roviny o Millerových indexech (2,1) a (1,0).
- Uveďte vyjádření pro Braggův zákon.
- Jaká je souvislost mezi hybností částice a odpovídající vlnovou délkou.

Srovnání rozsahu uplatnění strukturních metod

Do schématu doplňte na odpovídající místo následující metody:

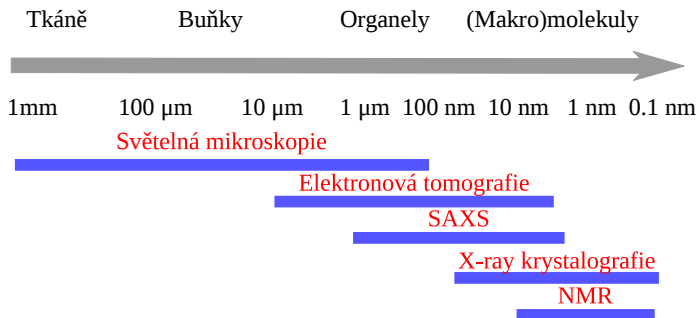
Rentgenová krystalografie, Elektronová tomografie, NMR, Světelná mikroskopie, SAXS rozptyl



Srovnání rozsahu uplatnění strukturních metod

Do schématu doplňte na odpovídající místo následující metody:

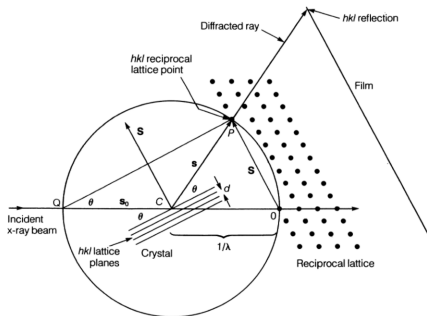
Rentgenová krystalografie, Elektronová tomografie, NMR, Světelná mikroskopie, SAXS rozptyl



Obecný koncept krystalografie - terminologie

Do následující tabulky doplňte odpovídající protipól:

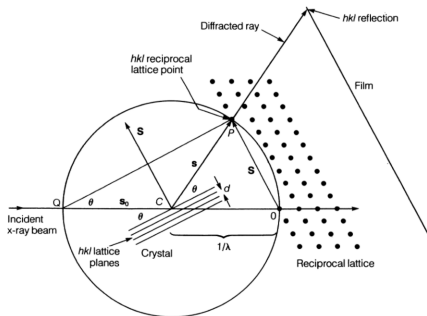
Prvek	Krystal(Direct)	FT obraz(Reciprocal)
Obsah	Krystal molekul	
Dimenze	$r(XYZ)$	
Funkce		Strukturní faktor $F(hkl)$
Vlastnosti	Spojité, reálná	



Obecný koncept krystalografie - terminologie

Do následující tabulky doplňte odpovídající protipól:

Prvek	Krystal(Direct)	FT obraz(Reciprocal)
Obsah	Krystal molekul	Difrakční obrazec
Dimenze	$r(XYZ)$	$S(hkl)$
Funkce	$\rho(r)$	Strukturální faktor $F(hkl)$
Vlastnosti	Spojitá, reálná	Diskrétní, komplexní

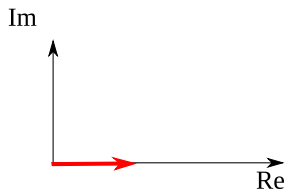
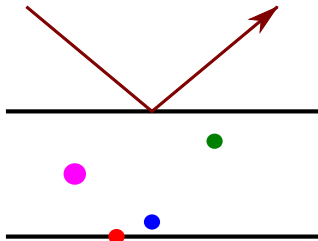


Amplituda a fáze

Amplituda rozptýleného záření závisí na ...

Fáze rozptýleného záření závisí na ...

$$f_{hkl} = f_j \cdot e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

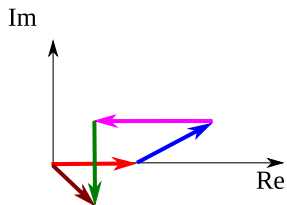
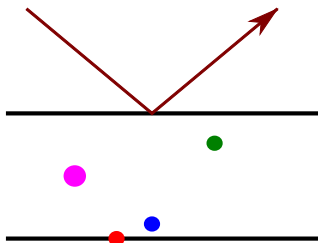


Amplituda a fáze

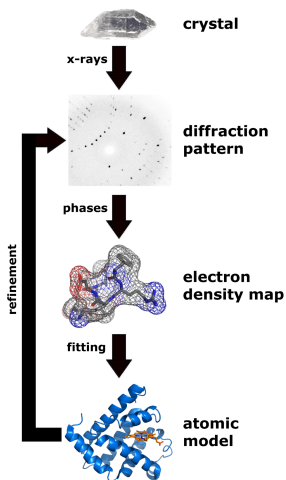
Amplituda rozptýleného záření závisí na ...

Fáze rozptýleného záření závisí na ...

$$f_{hkl} = f_j \cdot e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$$



Postup při strukturální analýze pomocí X-ray krystalografie



Výpočetní úloha č. 1

Určete vlnovou délku paprsku neutronů, které jsou v termodynamické rovnováze s okolím o teplotě 373 K.

hodnoty potřebných konstant: $1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$; $1,68 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$; $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

Výpočetní úloha č. 1

Určete vlnovou délku paprsku neutronů, které jsou v termodynamické rovnováze s okolím o teplotě 373 K.

hodnoty potřebných konstant: $1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$; $1,68 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$; $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

Řešení

$$E_k = \frac{1}{2}kT = \frac{p^2}{2m}$$
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{kmT}} = 0.22 \text{ nm}$$

Výpočetní úloha č. 2

Molekula krystaluje v plošně centrované kubické soustavě o mřížkovém parametru 12.3 nm a hustotě $1.287 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Jaká je její molekulová hmotnost?

Výpočetní úloha č. 2

Molekula krystaluje v plošně centrované kubické soustavě o mřížkovém parametru 12.3 nm a hustotě 1.287 g.cm^{-3} . Jaká je její molekulová hmotnost?

Řešení

$$N = 8 * \frac{1}{8} + 6 * \frac{1}{2} = 4$$

$$M_m = \frac{\rho \cdot V}{N \cdot m_u} = \frac{1287 \cdot (12,3 \cdot 10^{-9})^3}{4 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}} = 3.5 \text{ kDa}$$

Výpočetní úloha č. 3

Reflexe 1. řádu z roviny (1,1,1) kubického krystalu byla pozorována při úhlu 11.2° ? Jaký je rozměr elementární buňky, pokud bylo použito záření o vlnové délce 154 pm.

Výpočetní úloha č. 3

Reflexe 1. řádu z roviny (1,1,1) kubického krystalu byla pozorována při úhlu 11.2° ? Jaký je rozměr elementární buňky, pokud bylo použito záření o vlnové délce 154 pm.

Řešení

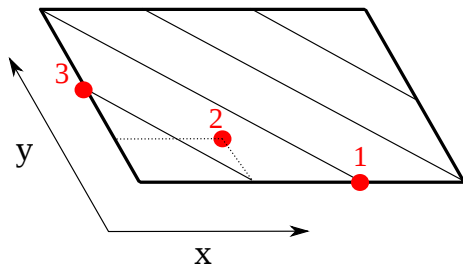
$$d_{111} = \frac{\lambda}{2\sin\theta}$$

$$d_{111} = \frac{a}{(h^2+k^2+l^2)^{1/2}}$$

$$a = \frac{3^{1/2}\lambda}{2\sin\theta} = 687 \text{ pm}$$

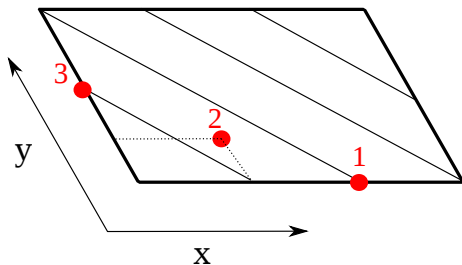
Výpočetní úloha č. 4

Vypočtete fázi rozptýleného záření pro body zadané v 2D mřížce s vyznačenými Braggovými rovinami.



Výpočetní úloha č. 4

Vypočtete fázi rozptýleného záření pro body zadané v 2D mřížce s vyznačenými Braggovými rovinami.



Řešení

$$e^{i\phi_1} = e^{i \cdot 2\pi(kx_1 + ly_1)} = e^{i \cdot 2\pi(3 \cdot \frac{2}{3} + 2 \cdot 0)} = e^{i4\pi} = 1$$

$$e^{i\phi_2} = e^{i \cdot 2\pi(kx_2 + ly_2)} = e^{i \cdot 2\pi(3 \cdot \frac{1}{3} + 2 \cdot \frac{1}{4})} = e^{i3\pi} = -1$$

$$e^{i\phi_3} = e^{i \cdot 2\pi(kx_3 + ly_3)} = e^{i \cdot 2\pi(3 \cdot 0 + 2 \cdot \frac{1}{2})} = e^{i2\pi} = 1$$

<http://dasher.wustl.edu/bio5357/reading/eisenberg-xray-79.pdf>
R.M. Sweet: Fundamentals of Crystallography
P. Atkins, J. de Paula: Physical Chemistry

Příště: Bimolekulární krystalografie - aplikace

Zadání úlohy

Úloha č. 1

W. H. a W. L. Bragg řešili strukturu jednoduchého krystalu tak, že vypočetli amplitudy strukturního faktoru předpokládaného modelu a srovnali je s naměřenými hodnotami difrakčního experimentu. Pomocí takového postupu zjistili, že NaCl krystaluje v plošně centrované kubické soustavě o následujících souřadnicích iontů:

$$\text{Cl}^-: 0,0,0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$\text{Na}^+: 0,0, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

Vypočtete amplitudu strukturního faktoru $|F|$, jeho fázi α a výslednou intenzitu $I = F \cdot F^*$ pro následující reflexe: 1,1,1; 2,0,0; 1,0,0 za předpokladu, že magnituda rozptylu iontu se rovná počtu elektronů.