

Egzamino klausimai (2014-06-09, „Įvadas į kristalografiją“)

1. Laikykime, kad baltymas išsikristalino primitivioje kubinėje gardelėje su 100 \AA kraštine. Koks reikalingas minimalus Rentgeno spindulių bangos ilgis, kad nuo šio kristalo stebėtume difraktogramoje bent vieną atspindį? Jei naudojame 1.54 \AA ($\text{CuK}\alpha$ linija, įprastinis baltymų kristalografijoje naudojamas bangos ilgis), kiek daugiausia galime stebėti atspindžių nuo tokio kristalo viena kryptimi (t.y., koks galimas didžiausias stebimas atspindžio h , k arba l indeksas), laikant, kad kristalas idealiai tvarkingas ir jo defektai skiriamosios gebos neriboja.
2. Turime 300 mm skersmens plokščią skritulio formos detektorių, statmeną pirminiam Rentgeno spinduliui. Pirminio spindulio pėdsakas, jei nebūtų sugertas švino gaudyklės, patektų į detektoriaus centrą. Šaltinio bangos ilgis yra 1.00 \AA . Koku atstumu nuo kristalo turime patalpinti detektorių, jei norime detektoriaus krašte pamatuoti 2.0 \AA skiriamosios gebos atspindžius nuo tiriamo kristalo?
3. Baltymo dalelė yra tetrameras, iškristalinta P432 kubinėje simetrijos grupėje. Ši grupė turi 4, 3 ir antro laipsnio simetrijos ašis. Kristalo elementariame narvelyje yra 24 asimetriniai vienetai. Baltymo monomero grandinę sudaro 100 a.r. liekanų. Laikydami, kad baltymo tankis kristale yra 1.34 g/cm^3 , o vidutinė a.r. liekanos mol. masė yra 120 Da , kristalo gardelės parametras yra 86 \AA (visos kraštinės kubinėje gardelėje yra vienodos, o visi kampai statūs – tik tokie galimi šioje simetrijos grupėje), nustatykite, ant kurios simetrijos ašies gali būti išsidėsčiusi baltymo molekulė (išnagrinėkite visas ašis – ar ant kiekvienos iš jų galime tikėtis rasti molekulę, ar ne; atsakymus pagrįskite simetrijos sugretinimo ir kristalo tankio apskaičiavimais).