

мого белка. Разностные ф-ции Патерсона для производных и нативного белка дают возможность локализовать в элементарной ячейке кристалла положения тяжёлых атомов. Координаты этих атомов и наборы модулей структурных амплитуд белка и его тяжелоатомных производных используются в спец. алгоритмах для оценки фаз структурных амплитуд. В белковой кристаллографии применяются поэтапные методы установления атомного строения макромолекул с последоват. переходом от низкого к более высокому разрешению (рис. 11). Разработаны и спец. методы уточнения атомного строения макромолекул по рентг. дифракц. данным. Объёмы вычислений при этом столь велики, что эффективно могут быть реализованы только на самых мощных ЭВМ.

Вопросы Р. с. а., связанные с изучением реального строения твёрдого тела по дифракц. данным, рассмотрены в ст. *Рентгенография материалов*.

Лит.: Белов Н. В., Структурная кристаллография, М., 1951; Бокий Г. Б., Порай-Кошиц М. А., Рентгеноструктурный анализ, 2 изд., т. 1, М., 1964; Липсон Г., Кокрен В., Определение структуры кристаллов, пер. с англ., М., 1956; Бюргер М., Структура кристаллов и векторное пространство, пер. с англ., М., 1961; Гинье А., Рентгенография кристаллов. Теория и практика, пер. с франц., М., 1961; Stout G. H., Jensen L. H., X-ray structure determination, N. Y.—L., 1968; Хейкер Д. М., Рентгеновская дифрактометрия монокристаллов, Л., 1973; Бландел Т., Джонсон Л., Кристаллография белка, пер. с англ., М., 1979; Вайштейн Б. К., Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии, М., 1979; Electron and magnetization densities in molecules and crystals, ed. by P. Becker, N. Y.—L., 1980; Кристаллография и кристаллохимия, М., 1986; Structure and physical properties of crystals, Barcelona, 1991. В. И. Симонов.

**РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ** (рентгеновские лучи) — электромагнитное излучение, занимающее спектральную область между УФ- и гамма-излучением в пределах длин волн  $\lambda$  от  $10^2$  до  $10^{-3}$  нм (или энергий фотонов  $h\nu$  от 10 эВ до неск. МэВ;  $\nu = c/\lambda$  — частота излучения). Открыто в 1895 В. К. Рентгеном (W. K. Roentgen). Р. и. с  $\lambda < 0,2$  нм обладает значит. проникающей способностью и наз. жёстким; при  $\lambda > 0,2$  нм Р. и. сильно поглощается веществом и наз. мягким.

**Источники рентгеновского излучения.** Наиб. распространённый источник Р. и. — рентг. трубка, в к-рой электроны, вырывающиеся из катода в результате термоэлектронной или автоэлектронной эмиссии, ускоряются электр. полем и бомбардируют металлич. анод. Атомы анода, возбуждаемые электронным ударом, и электроны, теряющие кинетич. энергию при торможении в веществе, испускают Р. и. Излучение рентг. трубки наз. первичным и состоит из двух частей: линейчатой (характеристическое Р. и.) и непрерывной (тормозное Р. и.; см. *Рентгеновские спектры*). При действии первичного Р. и. на вещество последнее испускает флуоресцентное (вторичное) Р. и., состоящее только из линейчатой части. Если мишень бомбардировать протонами,  $\alpha$ -частицами или более тяжёлыми ионами с энергией неск. МэВ на вуклон, то мишень будет испускать Р. и. линейчатого спектра с очень слабым непрерывным излучением (контрастность характеристич. линий такого Р. и. очень высокая). Для ускорения ионов используют электростатич. генераторы или циклотроны.

В качестве источников Р. и. могут служить также некоторые радиоактивные изотопы; один из них непосредственно испускает Р. и. (напр., атом  $^{56}\text{Fe}$  в результате К-захвата превращается в  $^{56}\text{Mn}$  и испускает К-спектр Mn), ядра др. радиоактивных элементов (напр.,  $^{210}\text{Po}$ ) испускают электроны или  $\alpha$ -частицы, бомбардирующие мишень, к-рая испускает Р. и. Интенсивность излучения изотопных источников на неск. порядков ниже интенсивности излучения рентг. трубки, а их габариты, вес и стоимость значительно меньше, чем у установки с рентг. трубкой.

Излучение рентг. диапазона присутствует и в *синхротронном излучении*. Это Р. и. можно выделить монохроматором и использовать для разл. целей. Оно на неск. порядков величины превосходит по интенсивности

излучение рентг. трубки. Ещё более интенсивную рентг. составляющую содержит *ондуляторное излучение*, к-рое на неск. порядков превосходит по интенсивности рентг. составляющую синхротронного излучения; в этих случаях энергия Р. и. столь велика, что кристалл-анализатор, используемый в *рентгеновской спектральной аппаратуре*, нагревается до неск. сотен °С и разрушается, если не приняты спец. меры защиты. Очень высокой интенсивностью обладает также рентг. составляющая *переходного излучения*. Естеств. источники Р. и. — Солнце и др. космич. объекты, в т. ч. Луна, поверхность к-рой бомбардируют частицы высокой энергии, испущенные Солцем.

**Характеристич. Р. и.** поликристаллич. анода рентг. трубки распространяется в пространстве изотропно, тогда как распространение тормозного Р. и. анизотропно. При малых напряжениях на рентг. трубке (до 20—30 кВ) тормозное Р. и. имеет макс. интенсивность в направлениях, лежащих в плоскости, перпендикулярной направлению движения электронов, возбуждающих Р. и. При очень высоких напряжениях на рентг. трубке (более неск. сотен тысяч кВ) почти всё излучение распространяется в направлении движения пучка электронов и выходит наружу через пластинку анода. Рентг. составляющая синхротронного излучения поляризована и распространяется только в плоскости кольца синхротрона. Вертикальная расходимость этого излучения очень мала.

**Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом.** Существуют два осн. типа взаимодействия Р. и. с веществом: фотоэффект и рассеяние Р. и. При фотоэффекте атом поглощает фотон Р. и. и испускает электрон одной из своих внутр. оболочек. Такое возбуждённое состояние атома неустойчиво, и через  $10^{-16}$ — $10^{-18}$  с он совершает переход в состояние с меньшей энергией; при этом электрон одной из более удалённых от ядра оболочек заполняет вакансию во внутр. оболочке. Избыток энергии либо испускается в виде рентг. фотона характеристич. излучения атома (излучат. переход), либо атом испускает ещё один электрон (безызлучат. переход, напр. при *оже-эффекте*) и становится дважды ионизованным. Переход атома в осн. состояние после его внутр. ионизации сопровождается испусканием фотонов характеристич. излучения и оже-электронов. (О зависимости вероятности поглощения Р. и. от энергии фотонов  $h\nu$  и ат. номера  $Z$  атомов вещества см. в ст. *Рентгеновские спектры*.)

В отличие от поглощения, при рассеянии Р. и. фотоны изменяют направление движения и могут потерять лишь часть своей энергии. При когерентном (упругом) рассеянии Р. и. энергия фотонов не изменяется, но после рассеяния они движутся в др. направлении (*рэлеевское рассеяние*). Некогерентное (неупругое) рассеяние с уменьшением энергии фотонов Р. и. может быть двух типов: корпускулярное (см. *Комптона эффект*) и комбинационное. При корпускулярном рассеянии происходит обмен импульсами между электроном атома и фотоном, в результате чего энергия фотона уменьшается на величину, зависящую от угла рассеяния, а из атома вылетает электрон отдачи. При комбинац. рассеянии за счёт части энергии фотона атом испускает электрон. Потеря энергии фотона в этом процессе от угла рассеяния не зависит. Обычно вероятность комбинац. рассеяния значительно меньше вероятности корпускулярного рассеяния; однако если комбинац. рассеяние происходит на одном из электронов  $L$ -оболочки, а энергия фотона совпадает с энергией электронов  $K$ -оболочки (с точностью до ширины  $K$ -уровня), то наблюдается резонансное комбинационное рассеяние Р. и., вероятность к-рого повышается на неск. порядков величины и значительно превосходит вероятность корпускулярного рассеяния. В области малых  $h\nu$  и  $Z$  преобладает когерентное рассеяние, при больших  $h\nu$  и  $Z$  — некогерентное рассеяние. В результате интерференции когерентно рассеянного