

ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ

Том VII

СОЕДИНЕНИЯ

№ 9

1966

УДК 678.01 : 53

ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ПОД МАЛЫМИ УГЛАМИ ДЛИННЫМИ ЖЕСТКИМИ МАКРОМОЛЕКУЛАМИ В РАСТВОРЕ

Б. А. Федоров, В. Г. Алешин

Как известно, рентгеноструктурный анализ при наличии современной вычислительной техники является самым мощным методом прямого исследования структуры упорядоченных систем, в том числе длинных жестких макромолекул, ориентированных определенным образом относительно первичного пучка (см., например, [1]). Однако одна из трудностей этого метода состоит в получении образца, обладающего высокой степенью ориентации макромолекул, причем, если нас интересует структура макромолекул в растворе, то не всегда существуют основания утверждать, что все ее элементы при переходе макромолекул в ориентированное состояние останутся неизменными. В связи с этим представляет несомненный интерес изучение строения жестких макромолекул непосредственно в растворе, в котором при достаточно слабой концентрации можно считать их совершенно неупорядоченными.

Ряд работ, выполненных за последние годы, показал, что метод рассеяния рентгеновских лучей под малыми углами может давать надежную информацию об общих параметрах жестких макромолекул в растворе, таких, как радиус инерции всей молекулы [2], радиус инерции относительно ее оси [3, 6], диаметр макромолекул, моделируемых сплошным однородным цилиндром [4], а также и некоторые сведения о распределении электронной плотности внутри самих молекул [5]. Следует отметить, что при определении этих (а также некоторых других) параметров используется, как правило, не вся экспериментальная кривая, а только та ее часть, которая в наибольшей степени зависит от изучаемого параметра, в то время как для получения более полных и точных данных о строении молекул желательно привлечь к рассмотрению всю индикатрису рассеяния, использовав таким образом максимально возможную информацию, заложенную в экспериментальной кривой.

Исходя из этого, в настоящей работе рассмотрена теория малоуглового рассеяния рентгеновских лучей длинными жесткими макромолекулами в растворе, обладающими цилиндрически симметричной и не меняющейся при смещении вдоль основной оси функцией распределения электронной плотности. Из теории следует, что эта функция, зависящая в рассматриваемом классе макромолекул от одного параметра — расстояния от данной точки до оси молекулы, может быть определена путем соответствующей обработки всей экспериментальной кривой малоуглового рассеяния. Кроме того, получено выражение, дающее интенсивность рассеяния спиральми в растворе, которыми также можно моделировать широкий класс жестких макромолекул.

Индикатриса рассеяния рентгеновских лучей длинными цилиндрами в растворе

Рассмотрим выражение для интенсивности рассеяния цилиндром высоты b , электронная плотность которого $\rho(ar)$ обращается в нуль при $r > 1$ (a — численный параметр), причем мы полагаем $a^2/b^2 \ll 1$. Используя формулу Дебая [7], дающую уже усредненную по всем ориентациям цилиндра относительную интенсивность рассеяния $I(\mu)$ ($\mu = (4\pi/\lambda) \sin \theta$, λ — длина волны рентгеновских лучей, 2θ — угол рассеяния), имеем в цилиндрических координатах (ср. [13]):

$$\begin{aligned}
 I(\mu) &= \frac{a^4 b^2}{\left[\int_v \rho(ar) dv \right]^2} \iint_{(v_1)(v_2)} \rho(ar_1) \rho(ar_2) \times \\
 &\times \frac{\sin(\mu \sqrt{b^2(z_1 - z_2)^2 + r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)})}{\mu \sqrt{b^2(z_1 - z_2)^2 + r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}} \cdot \\
 &\cdot r_1 r_2 dr_1 dr_2 dz_1 dz_2 d\varphi_1 d\varphi_2 = \frac{a^4}{M_c^2} \iint_{(v_1)(v_2)} \rho(ar_1) \rho(ar_2) \times \\
 &\times \frac{\sin(\mu \sqrt{b^2(z_1 - z_2)^2 + a^2 X^2})}{\mu \sqrt{b^2(z_1 - z_2)^2 + a^2 X^2}} r_1 r_2 dr_1 dr_2 dz_1 dz_2 d\varphi_1 d\varphi_2 = \\
 &= \frac{2a^4}{M_c^2} \iint_{(v_1)(v_2)} \rho(ar_1) \rho(ar_2) d\sigma_1 d\sigma_2 \left[\int_0^1 \frac{\sin(\mu \sqrt{b^2 t^2 + a^2 X^2})}{\mu \sqrt{b^2 t^2 + a^2 X^2}} (1-t) dt \right], \quad (1)
 \end{aligned}$$

где $X^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$, $d\sigma_1 = r_1 dr_1 d\varphi_1$,

$$M_c = \int_0^1 2\pi a^2 r \rho(ar) dr \quad (2)$$

— «масса» электронов, находящихся в поперечном сечении цилиндра. Пропизведена замена переменных $z_1 - z_2 = t$, $z_1 = z_1$, позволившая выполнить одно интегрирование по z_1 . Если $\mu \sqrt{b^2 t^2 + a^2 X^2} = x$, а J_v — функция Бесселя v -го порядка, то

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 \frac{\sin(\mu \sqrt{b^2 t^2 + a^2 X^2})}{\mu \sqrt{b^2 t^2 + a^2 X^2}} dt &= -\frac{1}{\mu b} \int_{\mu a X}^{\mu \sqrt{a^2 X^2 + b^2}} \frac{\sin x dx}{\sqrt{x^2 - a^2 \mu^2 X^2}} = \\
 &= \frac{1}{\mu b} \int_{\mu a X}^{\infty} \frac{\sin x dx}{\sqrt{x^2 - a^2 \mu^2 X^2}} - \frac{1}{\mu b} \int_{\mu \sqrt{a^2 X^2 + b^2}}^{\infty} \frac{\sin x dx}{\sqrt{x^2 - a^2 \mu^2 X^2}} = \\
 &= \frac{\pi}{2\mu b} J_0(a\mu X) - \frac{1}{\mu b} \int_{\mu b \sqrt{1+a^2 X^2/b^2}}^{\infty} \frac{\sin x dx}{x \sqrt{1-a^2 X^2/b^2}}. \quad (3)
 \end{aligned}$$

Так как в последнем интеграле $x \geq \mu b$, то величинами $a^2 X^2/x^2$ и $a^2 X^2/b^2$ можно пренебречь по сравнению с единицей, и, продолжая равенство для $\mu b \gg 1$,

$$\frac{\pi}{2\mu b} J_0(a\mu X) - \frac{1}{\mu b} \int_{\mu b}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2\mu b} J_0(a\mu X) - O\left(\frac{1}{\mu^2 b^2}\right), \quad (4)$$

$$\int_0^1 \frac{\sin(\mu \sqrt{b^2 t^2 + a^2 X^2})}{\mu \sqrt{b^2 t^2 + a^2 X^2}} t dt = \frac{1}{\mu^2 b^2} \int_{\mu a X}^{\mu \sqrt{a^2 X^2 + b^2}} \sin x dx = O\left(\frac{1}{\mu^2 b^2}\right), \quad (5)$$

так как последний интеграл — ограниченная величина.

Таким образом, учитывая только один член разложения по $1/\mu b$, из (4) и (5) имеем:

$$I(\mu) = \frac{\pi a^4}{\mu b M_c^2} \int_{(r_1)}^1 \int_{(r_2)}^1 \rho(ar_1) \rho(ar_2) J_0(a\mu X) d\sigma_1 d\sigma_2 = \\ = \frac{2\pi a^4}{\mu b M_c^2} \int_{r_1=0}^1 \int_{r_2=0}^1 \rho(ar_1) \rho(ar_2) dr_1 dr_2 \int_0^{2\pi} J_0(\mu a \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos t}) \times (6) \\ \times (2\pi - t) dt.$$

Используя «теорему сложения» цилиндрических функций [8]

$$J_0(\mu a \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos t}) = J_0(\mu ar_1) J_0(\mu ar_2) - \\ - 2 \sum_{k=1}^{\infty} J_k(\mu ar_1) J_k(\mu ar_2) \cos kt, \quad (7)$$

нетрудно упростить:

$$\int_0^{2\pi} J_0(\mu a \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos t}) (2\pi - t) dt = 4\pi^2 J_0(\mu ar_2) J_0(\mu ar_2) - \\ - \frac{4\pi^2}{2} J_0(\mu ar_1) J_0(\mu ar_2) = 2\pi^2 J_0(\mu ar_1) J_0(\mu ar_2) \quad (8)$$

и, подставляя (7) в (5),

$$I(\mu) = \frac{4\pi^3 a^4}{\mu b M_c^2} \left[\int_0^1 \rho(ar) J_0(\mu ar) r dr \right]^2. \quad (9)$$

Полученная формула (9) при $\rho(ar) = 1$ (что соответствует равномерному распределению электронной плотности внутри цилиндра) переходит в известное выражение, дающее относительную интенсивность рассеяния однородным длинным цилиндром [2]

$$I(\mu) = \frac{4\pi^3 a^4}{\mu b M_c^2} \left[\int_0^1 J_0(\mu ar) r dr \right]^2 = \frac{4\pi}{\mu b} \left[\frac{J_1(\mu a)}{\mu a} \right]^2, \quad (10)$$

так как в этом случае $M_c = \pi a^2$.

Входящий в выражение (9) интеграл является интегралом Фурье — Бесселя, который, как известно, обладает свойством обратимости [10]. Расширяя пределы интегрирования в (9) до $r = \infty$ (что возможно, так как, по нашему предположению, $\rho(ar)$ отлична от нуля только при $r \leq 1$):

$$\sqrt{\frac{I(\mu) \mu b M_c^2}{4\pi^3 a^4}} = \int_0^\infty \rho(ar) J_0(\mu ar) r dr \quad (11)$$

и используя обратное преобразование интеграла Ханкеля [11]:

$$\rho(ar) = \sqrt{\frac{b M_c^2}{4\pi^3 a^4}} \int_0^\infty \sqrt{I(\mu) \mu} J_0(a\mu r) \mu d\mu, \quad (12)$$

получаем искомое выражение, дающее радиальную функцию распределения электронной плотности относительно оси цилиндра через интенсив-

ность рассеяния и являющееся универсальным в рассматриваемом классе макромолекул в том смысле, что оно не связано с какими-либо представлениями о свойствах распределения $\rho(ar)$. Отметим, что решение аналогичной задачи, предлагаемое в недавней работе Кирсте [5], не обладает такой полнотой, будучи основанным на довольно грубых предположениях о характере распределения электронной плотности в поперечном сечении нитевидных макромолекул.

Как мы уже отмечали, формулы (9) — (12) справедливы при достаточно больших углах рассеяния, когда $\mu b \gg 1$, т. е. когда рентген «не видит» концов цилиндра. Рассмотрим зависимость интенсивности $I(\mu)$ от $\rho(ar)$ при самых малых из тех углов рассеяния, когда выражение (9) только становится справедливым, иными словами, при тех углах, когда рентген едва перестает «видеть» концы цилиндра. В этом случае можно считать μb порядка нескольких единиц, и так как $a^2/b^2 \ll 1$, то $\mu \ll 1$. Тогда в выражении (9) справедливо разложение $J_0(\mu ar)$ в ряд и

$$\begin{aligned} I(\mu) &= \frac{4\pi^3 a^4}{\mu b M_c^2} \left\{ \int_0^1 \rho(ar) \left[1 - \frac{\mu^2 a^2 r^2}{4} + \dots \right] r dr \right\}^2 = \\ &= \frac{\pi}{\mu b M_c^2} \left[\int_0^1 2\pi a r \rho(ar) d(ar) - \frac{\mu^2}{4} \int_0^1 2\pi a r \rho(ar) (ar)^2 d(ar) + \dots \right]^2 = \\ &= \frac{\pi}{\mu b M_c^2} \left[M_c - \frac{\mu^2}{4} M_c R_c^2 \right]^2 \simeq \frac{\pi}{\mu b} \left[1 - \frac{\mu^2}{2} R_c^2 + \dots \right], \end{aligned} \quad (13)$$

где M_c — определена выражением (2), а $R_c^2 = \frac{1}{M_c} \int_0^1 2\pi a^4 r^3 \rho(ar) dr$ — квадрат электронного радиуса инерции макромолекулы относительно ее оси. Как видно из (13), индикатриса $I(\mu)$ при рассматриваемых углах рассеяния представляет произведение двух факторов, один из которых обусловлен нитевидным характером цепи ($\pi/\mu b$ — интенсивность рассеяния одномерной непрерывной палкой длины b при «больших малых» углах [17]), а другой связан с наличием поперечных размеров. Выражение (13), полученное ранее в работах [3] и [11] при анализе рассматриваемой модели при помощи функции Паттерсона, в данном случае является простым следствием общей формулы (9). Из (13)

$$\lg [I(\mu) \mu] \simeq \lg \frac{\pi}{b} - \frac{\mu^2 R_c^2}{2} \quad (14)$$

и, таким образом, построение графика зависимости $\lg [I(\mu) \mu]$ от μ^2 позволяет по наклону прямой на соответствующем участке индикатрисы рассеяния определять «электронный» радиус инерции поперечного сечения макромолекулы (метод Кратки [12]).

Основные формулы (9) и (12) выведены в предположении, что рассматриваемые макромолекулы абсолютно жесткие, однако, разумеется, они станут справедливыми в том случае, когда молекулы обладают ограниченной гибкостью, при которой средняя длина жесткого участка значительно больше ее диаметра, т. е. когда рентген не может одновременно «видеть» распределения электронной плотности в поперечном сечении и особенностей, связанных с полужестким характером цепи. В связи с этим выражения (9) и (12) могут оказаться полезными при интерпретации экспериментальных данных по малоугловому рассеянию рентгеновских лучей обширным классом полужестких макромолекул.

Авторами была проведена обработка кривых рассеяния, заимствованных из работы [9], молекулами ДНК в солевых растворах. Так как эти

кривые были получены при использовании «бесконечно» высоких и узких щелей, то первый этап обработки состоял в пересчете снятых прямо с экспериментальной кривой значений интенсивности рассеяния на «точечную» коллимацию по составленной для электронной вычислительной машины БЭСМ-2 программе [19], основанной на общей теории внесения

коллимационных поправок [14, 15]. Далее нами была составлена программа для БЭСМ-2, позволяющая провести расчеты функции $\rho(ar)$ по формуле (12). На рис. 1 приводится график одной из рассчитанных таким образом $\rho(ar)$ (другие кривые близки к ней). Необходимо отметить весьма низкую точность полученных значений интенсивности рассеяния еще до их обработки (точки снимали прямо с кривой), причем в дальнейшем, особенно при коллимационном пересчете, были внесены дополнительные ошибки, в результате чего детальные особенности функции $\rho(ar)$ оказались неразрешенными. Тем не менее, как это видно из рис. 1, $\rho(ar)$ дает вполне удовлетворительное значение a (полное спадение электронной плотности), соответствующее 17 Å (ср. [16]), и эффективный радиус макромолекулы (порядка 12–13 Å), согласующийся со спиралью Крика — Уотсона.

Существенно подчеркнуть, что формула (12) и основанный на ней метод расчета $\rho(ar)$ справедливы лишь в области малоуглового рассеяния, когда интеграл, входящий в выражение (9), не меняет знака. Как показывают простые оценки, в случае приведенного пересчета для ДНК интеграл меняет знак (даже при самом неблагоприятном распределении $\rho(ar)$) лишь при $20 \sim 3,5^\circ$, причем получаемое разрешение

Рис. 1. Радиальная функция распределения электронной плотности $\rho(ar)$, рассчитанная по формуле (12) для молекул ДНК по данным работы [9]

соответствует ~ 10 Å.

Рассеяние рентгеновских лучей спиральными макромолекулами в растворе

Получим выражение для интенсивности малоуглового рассеяния рентгеновских лучей классом жестких макромолекул, моделируемых простой спиралью с непрерывно распределенной единичной линейной плотностью рассеивающих центров, и рассмотрим методы определения параметров спирали из индикатрисы рассеяния. Пусть спираль имеет высоту b , шаг $2\pi c$ и радиус a , тогда положение точки на спирали можно характеризовать одной цилиндрической координатой — углом поворота θ вокруг оси, и расстояние r_{pt} между двумя любыми точками p и t , принадлежащими спирали, будет

$$r_{pt} = \sqrt{2a^2 - 2a^2 \cos(\theta_p - \theta_t) + c^2(\theta_p - \theta_t)^2}, \quad (15)$$

а контурная длина L спирали

$$L = k \frac{a}{c} \sqrt{a^2 + c^2}, \quad (16)$$

где $k = b/a$.

По формуле Дебая [7] относительная интенсивность рассеяния спиралью будет иметь вид:

$$I_{\text{сп}}(\mu) = \frac{1}{L^2} \int_0^L \int_0^L \frac{\sin(\mu \sqrt{2a^2 - 2a^2 \cos(\theta_p - \theta_t) + c^2(\theta_p - \theta_t)^2})}{\mu \sqrt{2a^2 - 2a^2 \cos(\theta_p - \theta_t) + c^2(\theta_p - \theta_t)^2}} dL_p dL_t. \quad (17)$$

Так как $dL_p = \sqrt{a^2 + c^2} d\theta_p$, то заменой переменных $\theta_p - \theta_t = \theta$, $\theta_p = \theta$ и интегрированием по θ_p приходим к однократному интегралу

$$I_{\text{сп}}(\mu) = \frac{2a^2(1+\kappa^2)}{L_2} \int_0^{L/a \sqrt{1+\kappa^2}} \left(\frac{L}{a \sqrt{1+\kappa^2}} - \theta \right) \frac{\sin(\gamma \sqrt{4\sin^2(\theta/2) + \kappa^2\theta^2})}{\gamma \sqrt{4\sin^2(\theta/2) + \kappa^2\theta^2}} d\theta, \quad (18)$$

где $\gamma = \mu a$, а $\kappa = c/a$ характеризует степень растянутости спирали. Этот интеграл в несколько преобразованном виде

$$I_{\text{сп}}(\mu) = \frac{4\kappa^2}{k^2} \int_0^{k/2\kappa} \left(\frac{k}{\kappa} - 2\theta \right) \frac{\sin(2\gamma \sqrt{\sin^2\theta + \kappa^2\theta^2})}{2\gamma \sqrt{\sin^2\theta + \kappa^2\theta^2}} d\theta \quad (19)$$

был численно рассчитан на БЭСМ-2 по составленной авторами программе для значения $k = 100$ и κ , меняющейся от 0,01 до 10. Проведенное вычисление зависимости $I_{\text{сп}}(\mu)$ от μ хорошо согласуется с более сложными расчетами, выполненными Кирсте [18] по рассеянию спиральными, состоящими из дискретных рассеивающих центров.

Из физических соображений ясно, что при достаточно малых κ , соответствующих сильно сжатой спирали, кривая рассеяния в широком интервале углов должна хорошо описываться формулой, дающей индикатрису рассеяния полым цилиндром радиуса a . Такую индикатрису рассеяния можно получить, рассмотрев по формуле (9) случай, когда радиальная функция электронной плотности

$$\rho(ar) = \begin{cases} 0 & 0 \leq r \leq 1-\epsilon \\ 1 & 1-\epsilon < r \leq 1. \end{cases} \quad (20)$$

Тогда

$$I_\epsilon(\mu) = \frac{\pi a}{\gamma b \epsilon^2} \left[\int_{1-\epsilon}^1 r J_0(\gamma r) dr \right]^2 = \\ = \frac{\pi a}{\gamma b \epsilon^2} \left[\int_0^1 r J_0(\gamma r) dr - \int_0^{1-\epsilon} r J_0(\gamma r) dr \right]^2, \quad (21)$$

и после простых преобразований с использованием (10) имеем:

$$I_{\text{пол. цил.}}(\mu) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} I_\epsilon(\mu) = \frac{\pi a}{b \gamma^3} \left\{ \left(\frac{dJ_1(\gamma)}{d\gamma} \right)^2 \gamma^2 + \right. \\ \left. + 2J_1(\gamma) \frac{dJ_1(\gamma)}{d\gamma} \gamma + J_1^2(\gamma) \right\} = \frac{\pi a}{\gamma b} J_0^2(\gamma). \quad (22)$$

В зависимости $I_{\text{пол. цил.}}(\mu)\gamma^2$ от γ будет наблюдаться ряд максимумов и минимумов, абсциссы которых удовлетворяют уравнению

$$2\gamma J_1(\gamma) = J_0(\gamma) \quad (23)$$

с решением для первого максимума

$$\gamma_1 \approx 0,96. \quad (24)$$

На рис. 2 приведены графики зависимости $I(\mu)\gamma^2$ от γ для спирали $\kappa = 0,5; 0,64; 0,8; 1; 2$, а также для длинной палки ($\kappa = \infty$) и полого цилиндра ($\kappa = 0$), рассчитанного по формуле (22) с домножением на γ^2 .

Из рисунка видно хорошее согласие кривых рассеяния полого цилиндра и достаточно сжатых спиралей. С увеличением χ появляется резкий излом, начиная с которого кривые рассеяния спиралью и полым цилиндром расходятся, смещаются влево, причем, как нетрудно убедиться, абсцисса этого излома подчиняется соотношению

$$\gamma\chi = 1, \quad (25)$$

а положение максимума, определяемое по (24), остается неизменным при тех χ , пока излом находится правее максимума.

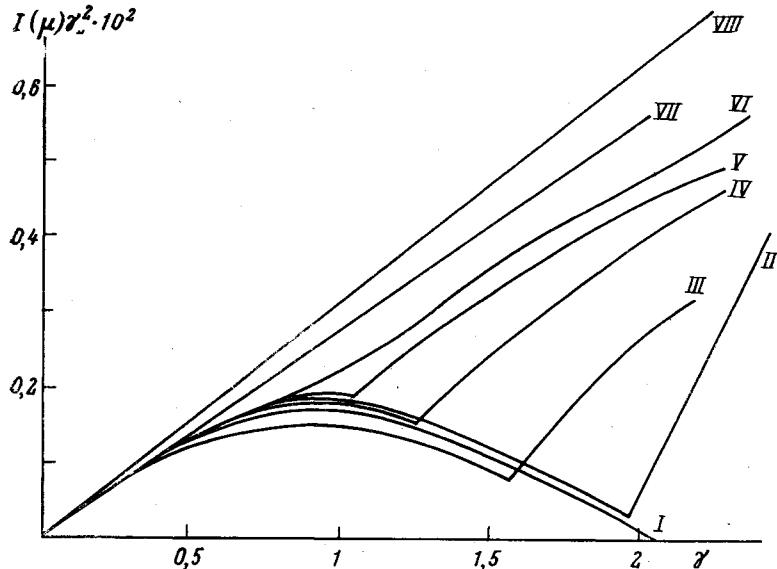


Рис. 2. Индикаторы рассеяния спиралью, рассчитанные на БЭСМ-2 по формуле (19) со следующими χ : $II - 0,5$; $III - 0,64$; $IV - 0,8$; $V - 1$; $VI - 1,2$; $VII - 2$. Кривая с $\chi = 0,64$ заимствована из работы [18]. I — полный цилиндр, $VIII$ — палка

Таким образом, изложенная выше теория свидетельствует о возможности определения основных параметров спиралей из графика зависимости $I(\mu)\gamma^2$ от γ : из положения первого максимума находится по формуле (24) ее радиус, а по абсциссе излома — шаг спирали.

Выводы

1. Получено выражение для интенсивности рассеяния рентгеновских лучей под малыми углами длинными неориентированными цилиндрами с цилиндрически симметричной и не зависящей от смещения вдоль основной оси функцией распределения электронной плотности. Связь между интенсивностью рассеяния и электронной плотностью осуществляется при помощи интеграла типа Фурье — Бесселя, обращение которого дает прямое выражение электронной плотности через интенсивность рассеяния.

2. Расчет радиальной плотности молекул ДНК, осуществленный в соответствии с рассматриваемой теорией на основе данных Луззати с сотрудниками, дал удовлетворительное согласие с современными представлениями о структуре ДНК.

3. Проведен расчет рассеяния простыми спиралью и предложен метод определения их параметров из положения максимумов и изломов на кривой рассеяния.

Институт высокомолекулярных
соединений АН СССР

Поступила в редакцию
5 VII 1965

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. К. Вайнштейн, Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах. Изд. АН СССР, 1963.
2. A. Guinier, G. Fournet, Small-angle Scattering of X-rays, N. Y., 1955.
3. V. Luzzati, Acta crystallogr., 13, 939, 1960.
4. Б. А. Федоров, О. Б. Птицын, Докл. АН СССР, 135, 882, 1963.
5. R. G. Kirste, Z. phys. Chem., Neue Folge, 42, 351, 1964.
6. O. Kratky, G. Porod, Acta phys. austriaca, 2, 433, 1948.
7. P. Debye, Phys. Zs., 28, 135, 1927.
8. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Изд. Физматгиз, 1962.
9. V. Luzzati, A. N. Nicolaeff, F. Masson, J. Mol. Biol., 3, 185, 1961.
10. И. Снедdon, Преобразование Фурье, Изд. иностран., лит., 1955.
11. V. Luzzati, Acta Crystallogr., 10, 136, 1957.
12. O. Kratky, Makromolek. Chem., 35a, 12, 1960.
13. Б. А. Федоров, Вестн. ЛГУ, 10, 29, 1965.
14. A. Guinier, G. Fournet, J. phys. et radium, 8, 345, 1947.
15. A. Guinier, G. Fournet, Nature, 160, 501, 1947.
16. R. E. Franklin, R. G. Gosling, Nature, 172, 156, 1953.
17. T. Neugebauer, Ann. Phys., 42, 509, 1943.
18. R. G. Kirste, Z. phys. Chem., Neue Folge, 42, 358, 1964.
19. Б. А. Федоров, Л. А. Фейгин, А. Т. Дембо, Кристаллография 10, 788, 1965.

THEORY OF SMALL ANGLE X-RAY SCATTERING BY LONG RIGID MACROMOLECULES IN SOLUTION

B. A. Fedorov, V. G. Aleshin

Summary

It is derived an equation for the intensity of small angle X-ray scattering by long unoriented cylinders with cylindrical symmetry and with electron distribution function independent on the distance along the main axis. The relationship between scattering intensity and electron density is carried with integral which conversion gives the direct expression of electron density through scattering intensity. The calculation of radial density of DNA molecules carried out taking into account Luzzati et. al. data gave satisfactory agreement with modern ideas about DNA structure. Beside this using computer it is calculated scattering by simple helixes and it is proposed a simple method of determination of their parameters from the positions of maxima and fracture points on the scattering curves.