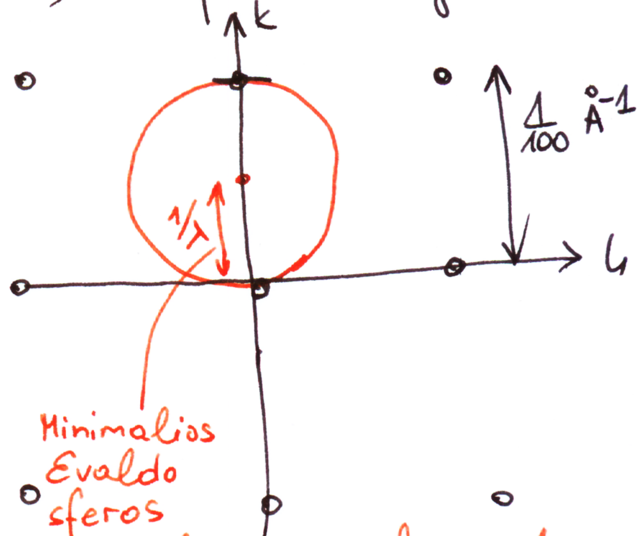
1 a) I būdas: naudojant Evaldo sferą.

Jei kubinės gardelės (primityvios) kraštinė 100 Å, atstumas (minimalus) tarp atv. gardelės mazgų bus:



$$a^* = \frac{1}{a} = \frac{1}{100\,Å} = 0{,}01\ Å$$

Min. Evaldo sferos skersmuo:

$$d_E = 2 \cdot \frac{1}{\lambda_{min}} = a^* = \frac{1}{a}$$

$$\lambda_{min} = 2 \cdot a = 200\,Å$$

su $\lambda > 200\,Å$ nematysime nei vieno atspindžio.

su $\lambda = 200\,Å$ turėsime vienintėlį atspindį — atspindį atgal ($2\theta = 180°$, $\theta = 90°$)

II būdas: naudojant Brego dėsnį

$$\frac{2\sin\theta}{\lambda} = \frac{n}{d}$$

$$\lambda = \frac{2d\sin\theta}{n}$$

didžiausią λ turėsime, kai

$\sin\theta \to \max$ $(\theta \in \mathbb{R})$, $n \to \min$ $(n \in \mathbb{N})$

$\sin\theta|_{max} = 1$ (kai $\theta = 90°$, $2\theta = 180°$) sklaidymas atgal

$n = 1$

$$\Downarrow$$

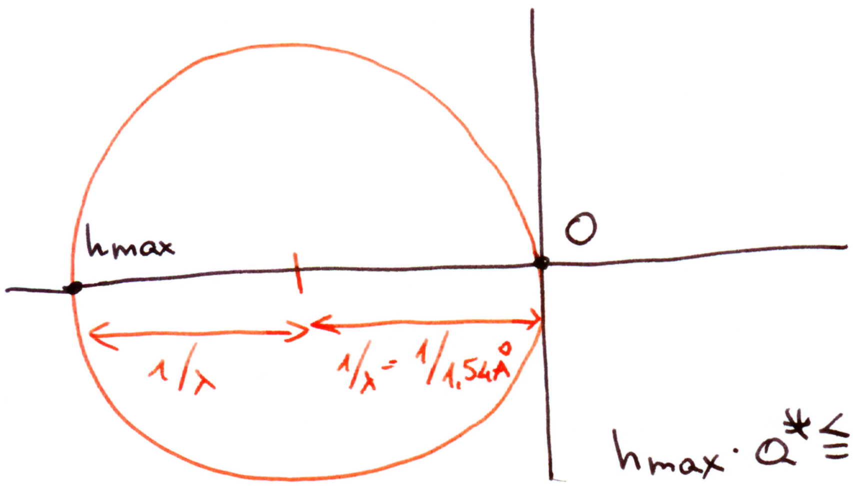
$$\lambda_{max} = 2d = 200\,Å$$

Šis λ_{max} yra tas pats kas ir λ_{min} I būde ☺

① (tęsinys)

b) $\lambda = 1{,}54\,\mathring{A}$, $a = 100\,\mathring{A}$, $a^* = \frac{1}{a} = 0{,}01\,\mathring{A}$

Naudojant Evaldo sferą:



Skaičiuojame, kiek atvirkštinės gardelės narvelių tilps į Evaldo sferą:

$$h_{max} \cdot a^* \leq \frac{2}{\lambda}$$

$$h_{max} = \left\lfloor \frac{2}{\lambda} \cdot \frac{1}{a^*} \right\rfloor = \left\lfloor 2\frac{a}{\lambda} \right\rfloor$$

$$h_{max} = \left\lfloor 2\frac{100\,\mathring{A}}{1{,}54\,\mathring{A}} \right\rfloor = \lfloor 129{,}8 \rfloor = 129$$

Naudojant Brego dėsnį:

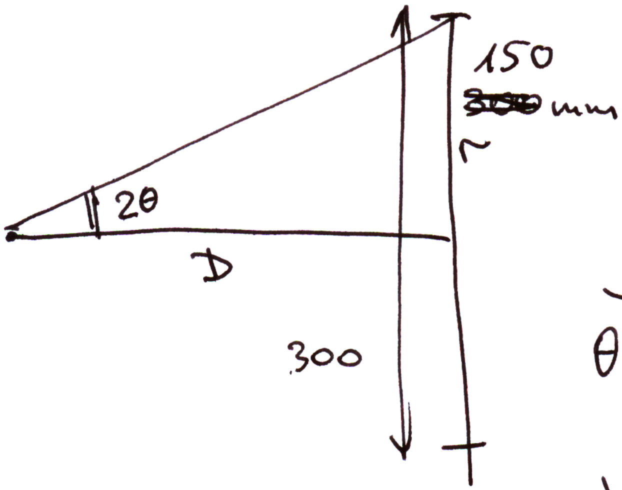
$$\frac{2\sin\theta}{\lambda} = \frac{h_{max}}{d}$$; $\boxed{\text{hmax gausime, kai } \sin\theta \to \max = 1}$

$$h_{max} = \frac{2d}{\lambda} = \frac{2a}{\lambda} = 2\,\frac{100\,\mathring{A}}{1{,}54} = 129{,}8$$

kadangi h yra sveikas skaičius kristale

$h_{max} = 129$ (ir galite suskaičiuoti $\sin\theta$ šiuo atveju... ☺)

②



$$\tan 2\theta = \frac{r}{D}\ ; \quad D = \frac{r}{\tan 2\theta}$$

$$\cancel{\theta = \frac{1}{2}\arctan\frac{r}{D}}$$

$$\frac{2\sin\theta}{\lambda} = \frac{1}{d}\ ; \quad \sin\theta = \frac{\lambda}{2d}$$

$$\theta = \arcsin\frac{\lambda}{2d}$$

$$\Downarrow$$

$$D = \frac{r}{\tan\left(2\arcsin\frac{\lambda}{2d}\right)}$$

$$D = \frac{\overset{150}{\cancel{300}}\ \text{mm}}{\tan\left(2\arcsin\frac{1{,}0\ \text{Å}}{2\cdot 2\ \text{Å}}\right)} = \frac{\overset{150}{\cancel{300}}\ \text{mm}}{\tan\left(2\arcsin\frac{1}{4}\right)} = \overset{271{,}1\ \text{mm}}{\cancel{542{,}2\ \text{mm}}}$$

③ Elem. narvelio tūris:

$$V = a^3$$

Asimetrinio vieneto tūris

$$V_a = \frac{V}{n_a} = \frac{a^3}{n_a}$$, čia $n_a = 24$, $a = 86$

Baltymo grandinės tūris

$V_b = m_b / \rho_b = m_e \cdot l / \rho_b$, čia m_e = vienos liekanos masė

l — peptido ilgis

$l = 100$

$\rho_b = 1{,}34\ g/cm^3$

Perskaičiuojame gramus į ~~D~~Daltonus:

$m_{\cancel{A}H}[g] \cdot N_A = \cancel{1g}\ 1\ [g/mol]$, $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$ $\frac{atomų}{molui}$

$[Da]$

$m_H[g] = \frac{1}{N_A}$

$m_e[g] = m_e[Da] \cdot \frac{1}{N_A}$

$$V_b = \frac{m_e[Da] \cdot l}{N_A \cdot \rho_b}\ \cancel{[cm^3]}\ [cm^3]$$

arba:

~~$\frac{x}{1\,g} = \frac{1\ dalelė}{N_A\ dalelių}$~~

~~$\frac{m_e\,Da}{1\,Da} = \frac{x\ dalelių}{N_A\ dalelių}$~~

~~$x = m_e \cdot [Da] \cdot N_A$~~

~~$\frac{1\ atomo}{N_A\ atomų} = \frac{y\ g}{1\ g}$~~

~~$y = \frac{1}{N_A}$~~

$$V_a = \frac{(86.0\ \mathring{A})^3}{24} = 26\,502{,}3\ \mathring{A}^3 = 26{,}5 \cdot 10^3\ \mathring{A}^3$$

$$V_b = \frac{120 \cdot 100\ g/mol}{6.02 \cdot 10^{23}\ 1/mol \cdot 1{,}34\ g/cm^3} = 1{,}4878 \cdot 10^{-20}\ cm^3$$

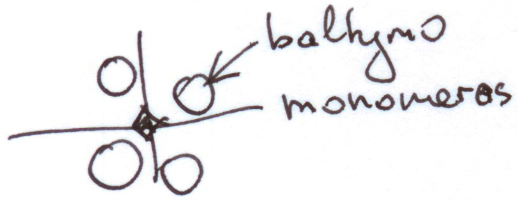
$$1\,cm^3 = (10^{+8}\ \mathring{A})^3 = 10^{24}\ \mathring{A}^3$$

$$V_b = 14{,}9 \cdot 10^3\ \mathring{A}^3$$

$$\frac{V_a}{V_b} = \frac{26,5}{14,9} = 1,8$$

t.y. V_a — asimetrinis vieneto ~~narvelio~~ tūris — 1,8 karto didesnis už baltymo grandinės tūrį. ⇒ Į vieną asimetrinį vienetą tilps daugiausią viena baltymo grandinė; dviem grandinėm ten jau per mažai vietos.

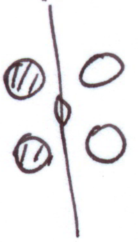
Jei dalelė išsidėsčiusi ant 4 laipsnio ašies, tada, jei ji yra žiedo pavidalo:



dalelė gali kristale susidaryti iš 4 asimetrinių vienetų, po vieną grandinę asimetriniame vienete. Tokia konfigūracija suderinama su kristalo tankiu ir kristalo bei dalelės simetrija. Išvada — tokia konfigūracija įmanoma.

Asimetriniai vienetai taip pat bus susieti ir 2 laipsnio ašimi; jei žiedas išsidėstęs ant 422 ašių susikirtimo, jis taip pat ~~sut~~ panaudos ir 2 laipsnio ašį.

Jei dalelė išsidėsčiusi ant 2 laipsnio ašies:



Jei tai vienintelė kristalografinė ašis, sutampanti su dalelės simetrijos ašimi, tada asimetriniame vienete turi būti 2 grandinės(beje, baltymo grandinės asimetriškos ir pačios, kaip taisyklė, ant simetrijos ašies neišsidėsto). Bet asimetrinio vieneto tūris per mažas 2 grandinėms

Išvada: baltymo tetrameras negali išsidėstyti ant 2 laipsnio ašies taip, kad tai būtų vienintelė jo simetrijos ašis; turi būti panaudota ir 4 laipsnio ašis, t.y. galime turėti tik 1-jį atvejį.

Ant 3 laipsnio ašies baltymo dalelė išsidėstyti negali, nes tada grandinių skaičius dalelėje būtų 3 kartotinis, o sąlygoje pasakyta, kad dalelė yra tetrameras.