

рически симметричных плотностей свободных (не вступивших в хим. связи) атомов данной структуры, к-рые расположены соответственно в точках с координатами  $x_i, y_i, z_i$ . При установлении по рентг. дифракц. данным деформац. электронной плотности наиб. сложен учёт

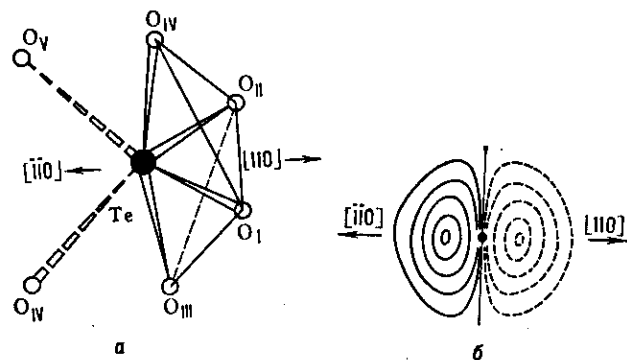


Рис. 8. Ближайшее окружение теллура атомами О в структуре  $\alpha$ - $\text{TeO}_2$  (а) и ангармоническая составляющая распределения плотности вероятности нахождения атома Те в данной точке пространства в процессе тепловых колебаний (б). Положительные (сплошные) и отрицательные (штриховые) линии равного уровня проведены через  $0,02 \text{ \AA}^{-3}$ .

тепловых колебаний атомов, существ. образом коррелирующих с характером и направлениями хим. связей. Т. о., деформац. плотность  $\delta\rho(x,y,z)$  отражает перераспределение в пространстве той части электронной плотности атомов, к-рая непосредственно участвует в образовании хим. связей (рис. 9).

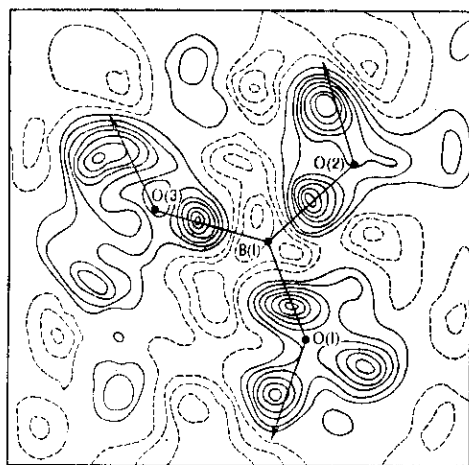


Рис. 9. Сечение синтеза деформационной электронной плотности кристалла  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$  плоскостью, проходящей через атомы О треугольной группы  $\text{BO}_3$ , в центре которой находится атом В. Максимумы на отрезках В — О указывают на ковалентный характер связей между этими атомами. Штриховыми линиями выделены области, из которых электронная плотность переместилась на химические связи. Линии равного уровня проведены через  $0,2 \text{ \AA}^{-3}$ .

Структурные исследования высокотемпературных сверхпроводников позволили установить их атомное строение и его связь с их физ. свойствами. Было показано, что в монокристаллах  $(\text{La,Sr})_2\text{CuO}_{4-x}$  темп-ра перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$  зависит не только от кол-ва Sr, но и от способа его статистич. размещения. Равномерное распределение атомов Sr в структуре является оптимальным для сверхпроводящих свойств. Концентрация Sr в определ. слоях структуры (рис. 10) ведёт к потере в этих слоях части кисло-

рода и к понижению  $T_c$ . Для кристаллов  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  методами Р. с. а. установлено упорядочение в размещении атомов О. В пределах одного кристалла установлено наличие ромбических по симметрии областей локального состава  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  с  $T_c \sim 90 \text{ К}$  и областей

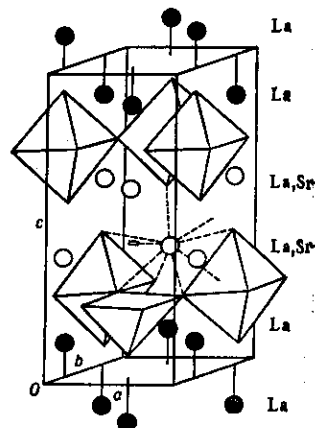


Рис. 10. Упорядоченное размещение атомов Sr по позициям лантана в структуре  $(\text{La,Sr})_2\text{CuO}_{4-x}$ . Атомы Cu находятся в  $[\text{CuO}_6]$ -октаэдрах. Дефектность по кислороду показана отсутствием у одного из Cu-полиэдров одной кислородной вершины. Позиции, полностью заселённые атомами La, показаны чёрными кружками. Светлые кружки — позиции лантана, в которых сконцентрированы и статистически размещены все атомы Sr.

$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,5}$  с  $T_c \sim 60 \text{ К}$ . В кристаллах с кол-вом кислорода меньше чем 6,5 атома на элементарную ячейку, наряду с областями ромбич. симметрии локального состава  $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,5}$  появляются области тетрагональной симметрии локального состава  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ , к-рые не переходят в сверхпроводящее состояние.

Для решения мн. задач физики твёрдого тела, химии, молекулярной биологии и др. весьма эффективно совместное использование методов рентгеноструктурного анализа и резонансных методов (ЭПР, ЯМР и др.). При исследовании атомного строения белков, нуклеиновых к-т, вирусов и др. объектов молекулярной биологии возникают специфич. сложности. Макромолекулы или более крупные биол. объекты необходимо прежде всего получить в монокристаллич. форме, после чего для их исследования можно применять все методы Р. с. а., развитые для изучения кристаллич. веществ. Проблема фаз структурных амплитуд для белковых кристаллов решается методом изоморфных замещений. Наряду с монокристаллами исследуемого нативного белка получают монокристаллы его производных с тяжёлоатомными добавками, изоморфными кристаллам исследуе-

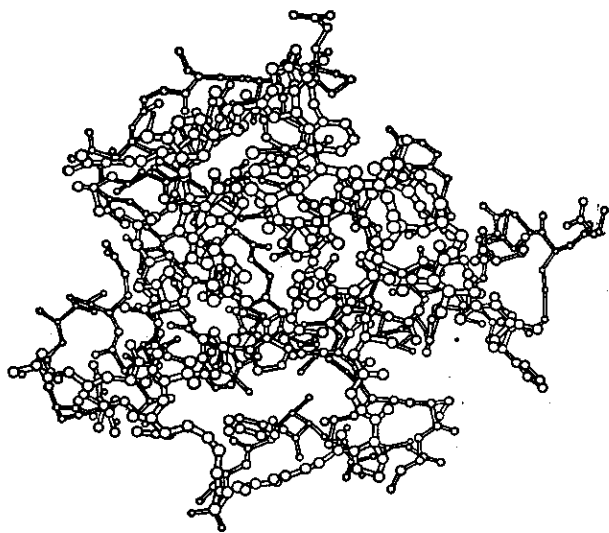


Рис. 11. Атомная модель молекулы гуанил-специфичной рибонуклеазы S, построенная на основе рентгеноструктурного исследования монокристаллов этого белка с разрешением  $1,55 \text{ \AA}$ .