

岁月留痕

《物理》四十年集萃

中国科学技术大学出版社

本书编委会 编

岁月留痕

《物理》四十年集萃

本书编委会 编

中国科学技术大学出版社

本书编委会

(以姓氏汉语拼音为序)

冯世平 刘寄星 王进萍 阎守胜
杨国桢 张 闯 朱 星 朱邦芬

图书在版编目(CIP)数据

岁月留痕:《物理》四十年集萃/本书编委会编. —合肥:中国科学技术大学出版社,2012.6
ISBN 978-7-312-03055-0

I. 岁… II. 本… III. 物理学—文集 IV. O4-53

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 115944 号

出版 中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路 96 号,230026
网址:<http://press.ustc.edu.cn>
印刷 安徽省瑞隆印务有限公司
发行 中国科学技术大学出版社
经销 全国新华书店
开本 787 mm × 1092 mm 1/16
印张 30.75
插页 2
字数 620 千
版次 2012 年 6 月第 1 版
印次 2012 年 6 月第 1 次印刷
定价 68.00 元

序 一

1972年《物理》创刊至今,已悄然走过了四十年,《物理》诞生于“文化大革命”中,经历了“科学的春天”,紧跟着三十多年中国改革开放的步伐,见证了我国繁荣发展的新时代。

值此《物理》不惑之年,本刊精选四十篇代表作,从各个不同的方面展示了中国物理学四十年来的发展历程,虽不全面,但在某种程度上也可视为我国物理学发展的一个缩影。在这一《物理》精华本的作者中,有德高望重的老一代,有中年栋梁之才,也有青年才俊,他们是中国物理学工作者的优秀代表。本书所选作品无不凝聚着作者和编辑们曾经为此付出的心血和努力,也显示了不同时代的印记和特征。

《物理》从创刊起就深受读者的喜爱和青睐,一代代物理学人从中感悟物理科学的真谛,了解最新的前沿动态,领略科学大师的风采,在早期的读者中,有不少已成为我国又一代物理学领军人物。

四十年来,《物理》的办刊宗旨和使命始终顺应时代发展和科技进步的需要,并赋予对读者的真诚和对物理学事业的热爱。特别是近年来,本刊无论是在内容、风格,还是在栏目设置等方面都做了诸多改进和有益探索,得到了读者的认可。

从读者到新一任的主编,我与《物理》相伴同行,亲历中国物理学当今的发展,迈向世界的发展前沿,甚为欣喜,并对《物理》的未来充满信心和希望,也希望广大读者继续予以关心、支持和帮助。

杨国桢

2012年5月

序 二

四十不惑

笔者从1986年起作为编委参与《物理》杂志的工作,从此便和《物理》结缘。在《物理》创刊四十周年之际,笔者到图书馆,从1972年的创刊号开始,逐本翻阅,发黄的纸张和淀积的微尘,让人感叹时光的流逝;而梳理那些目录篇章,则仿佛触摸到一个从幼芽破土到枝干茁壮的鲜活生命历程。掩卷沉思,印象最深的一点是:《物理》的足迹与我们社会的发展,特别是与中国物理学的进步息息相关;她一直在不断地学习、摸索和探究如何更好地服务于社会、服务于物理学界。

《物理》创刊于1972年6月,创刊在一个我国物理学家既无物理刊物可读,亦无处发表研究成果的时期,因而从一开始她便受到国内物理学界的广泛关注。尽管那时一些栏目的名称和文章,以至群体性的作者署名都有着鲜明的时代烙印,例如《新知识新进展》(1977年)、《工农兵学员科学研究总结报告选登》(1974~1976年)、《物理学为工农生产服务》(1976年)等栏目,以及《学习大寨精神,坚持为工农兵服务的精神——记大寨人民公社的定向爆破搬山造田》(1974年第6期)、《为人民探索预测预报地震的规律》(1977年第2期)等文章,但创刊号和第2期分别发表的两篇文章《2.5埃分辨率胰岛素晶体结构的研究》和《一个可能的重质量荷电粒子事件》却是中国物理学界当时最出色的重要研究成果。

《物理》的这一初始阶段结束于1977年末到1978年初,标志性的文章是1978年第1期首页王竹溪先生的《理论物理研究中应当正确对待的几个问题》,文章对理论与实验、理论与数学、物理模型与概念、理论物理与数学、理论物理与哲学指导思想间应有的关系等做了论述;第2期首页是汪德昭先生的《迎接科学大会,展望光辉未来》;此外还有王龙先生的《不要如浮云一样——为自然科学的基础理论恢复名誉》(1977年第4期)等文章,这些文章是国内各个领域当时进行的拨乱反正行动的真实写照。

《物理》杂志发展的第二阶段大体从1977~1978年延续到1983~1984年,这一时期,物理教学、科研等各项工作逐渐走上正轨。由于国内物理学界在相当长一段时间内几乎与世隔绝,对国际上物理学的发展和变化了解甚少,新的前沿和进展急需普及和介绍,杂志及时开辟了《知识和进展》、《物理讲座》专栏。这一阶段涌现出一批很好的评述文章,例如冯端先生的《凝聚态物理的回顾与展望》(1984年

第4期)等,深受读者的喜爱。特别值得一提的是:为系统讲解物理前沿学科的新知识和进展,1980年第4期新开了《讲座》栏目,开篇为于淦和郝柏林两位先生的《相变和临界现象》,讲座连载了数期,非常精彩,作者后来将其扩展成书(科学出版社,1984年),又成为了一本很受读者欢迎的高级科普读物。在这一阶段的《物理》杂志中,我们还可以看到当时一些年轻的物理学工作者对自己未来研究方向的思索,他们后来大多成为相关领域的佼佼者。

可以感觉到此后《物理》杂志进入一个稳定发展的时期,逐步形成了比较明确的办刊宗旨,有了稳定的栏目设置和读者群。其间,《物理》也发表了很多好的、有影响的文章,例如杨振宁先生的《几位物理学家的故事》(1986年第11期)、黄涛先生的《从高能物理的发展看北京正、负电子对撞机》(1988年第8期)、冯端先生的《当代凝聚态物理学的发展》(1989年第1期)、俞允强先生的《粒子物理和宇宙学》(1989年第3期)和郭可信先生的《五次对称及Ti-Ni准晶的发现与研究》(1989年第6期)等。从1994年开始到1999年,《物理》遭遇了新形势的挑战。一方面,政策规定大部分杂志改为自主出版,在市场经济的大潮中,《物理》需要为自己的生存争得发展空间;另一方面,众多的物理学工作者对发表文章有了更迫切的需求,导致的结果之一便是《知识和进展》栏目的部分文章像是直接出自研究生的开题报告,《物理学史和物理学家》栏目的一些文章则是对外文文章粗糙的翻译或改写。尽管如此,仍然可以看到杂志为提高质量所做的努力,即便是在上述两个栏目中,依然有一些很好的文章。与此同时,编辑们放眼海外,捕捉国内学者发表在国际著名刊物上的最新研究成果,及时新设了《研究快讯》栏目,深入浅出地介绍这些研究工作的背景、内容和价值,给处于低谷中的《物理》增添了一抹亮色。

2000年新世纪的到来,给《物理》杂志带来了新的转机和活力。在国内物理类杂志中,《物理》率先与国际接轨,加大了开本,并设计了彩色铜版纸封面,2000年第1期便以崭新的面貌登场,成为图书馆刊物架上物理类杂志中最吸引读者的一本。翻阅到这一期时,笔者的眼睛确实再次为之一亮,看得出刊物为提高质量做了多方面的努力:增设了《特约专稿》和《评述》栏目,邀请相关领域中有造诣的学者撰写;针对《物理学史和物理学家》栏目存在的问题,刘寄星先生特别着眼于近代中国物理学家,撰写了《中国物理学家与生物学家结合的典范——回顾汤佩松和王竹溪先生对植物细胞水分关系研究的历史性贡献》,为该栏目的文章设定了高起点;《知识和进展》改成了《前沿和进展》,新设置了《物理教育》、《学生园地》等栏目;云中客、戴闻和树华在《物理新闻和动态》栏目中的短篇报道新颖生动,也很受欢迎。从2003年开始,每年3月的《物理》均为庆祝“三·八”国际妇女节开设专栏。在2005年3月的《物理年巾帼论物理》栏目中,厚美瑛研究员的文章《我与物理》朴

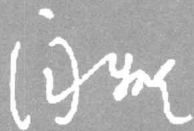
实感人;2006年《“三·八”国际妇女节专题》中王明贞先生讲述自己一生的《转瞬九十载》则令读者读之动容,2002年第1期起刊登了李华钟和沈鼎昌两位先生的《粒子诗抄》;宋菲君先生的《外公丰子恺先生鼓励我学物理》,图文并茂,也让人印象深刻。这些饶有风趣、轻松的文章,增加了杂志的吸引力,也给一贯以推理论证见长的《物理》注入了活泼乃至浪漫的色彩。

在这期间,杂志发生的另一重要变化是编辑部人员的年轻化。以古丽亚为首的几位年轻人富有朝气和活力,杂志多方面的变化以及网络化的建设和他们的努力是分不开的。编辑部王进萍尽管不是学物理出身,但她对物理学家和诺贝尔奖获得者的采访,问题中肯,且富人文色彩,是《物理》杂志颇具特色的文章。

2007年编委会更迭,整体年轻化,并扩充了海外编委的数量,杂志的风格呈现出新的变化。最突出的是第一线的工作人员成为撰稿人群的主体,杂志的内容更加鲜活;其次,杂志取消了从2006年开始的《前沿和进展》栏目,改为每期一个专题,三五篇文章,读者可集中获得相关领域的知识和信息。从2007年7月开始,每期一篇,连载曹则贤研究员撰写的《物理学咬文嚼字》,很受读者欢迎,这些文章2010年便结集成书,由新加坡World Scientific出版社出版。海外编委林志忠先生的《普渡琐记——从2010年诺贝尔化学奖谈起》等随笔也颇受读者的关注。

在《物理》的不惑之年回顾其发展历程,最大的感触是:我国国力的日益增强以及与之相伴的物理学研究长足的进步,为办好《物理》杂志奠定了最重要的基础;作者、读者和编者的共同努力,使《物理》得以在众多物理类杂志中占有了独特的、不可替代的地位。《物理》今天的成熟,源于厚重岁月的锤炼。而展望未来,或许我们还应该问一句:《物理》真的不惑了吗?这个问题让笔者想起2007年1月19日李荫远先生寄来的一封信,信中希望《物理》“多一些读者‘有兴趣,能读懂,且受益’的文章”。这让我们重新审视办刊的主旨,意识到除去文章的选题要好、为大家所关心、学术上要严谨外,主体文章的写作要深入浅出、通俗易懂。原因其实也很简单,《物理》不是学报,而是面对整个物理学界,供大家翻阅的“杂志”。在这方面,和国际上著名的同类杂志相比,不得不说,我们仍须努力。

“知者不惑”,四十年的岁月留痕见证了《物理》杂志的成长和成熟,本书精选的四十篇文章如同是成长链条上闪亮的珍珠。不惑之年的《物理》迎来的不仅是一个成熟的庆贺,更应当是通往美好未来的一个新的起点,让我们共同为她祝福吧!



2012年5月

目 录

序 一
杨国桢 1

序 二
四十不惑
阎守胜 111

2.5 埃分辨率胰岛素晶体结构的研究
胰岛素结构研究组 1

中子弹是怎么回事?
黄祖洽 23

理论物理研究中应当正确对待的几个问题
王竹溪 30

晶体缺陷研究的历史回顾
钱临照 37

相变和临界现象(I)
于 渌 郝柏林 49

相变和临界现象(II)
于 渌 郝柏林 59

相变和临界现象(III)
于 渌 郝柏林 66

我对吴有训、叶企孙、萨本栋先生的点滴回忆

钱三强 75

凝聚态物理的回顾与展望

冯 端 78

五次对称与准晶态

郭可信 105

从高能物理学的发展看北京正、负电子对撞机

黄 涛 111

声学 & 海洋开发

汪德昭 120

扭摆的故事

——简单的仪器与重要的成果

葛庭燧 128

对 21 世纪物理学的发展的一点猜想

彭桓武 140

模型在物理学发展中的作用

胡 宁 147

国立西南联合大学物理系

——抗日战争时期中国物理学界的一支奇葩(I)

沈克琦 156

国立西南联合大学物理系 ——抗日战争时期中国物理学界的一支奇葩(II)	
沈克琦	168

原子核裂变的发现:历史与教训 ——纪念原子核裂变现象发现 60 周年	
何泽慧 顾以藩	181

我国半导体物理研究进展	
夏建白 黄 昆	195

回顾与展望 ——纪念量子论诞生 100 周年	
周光召	203

我的研究生涯	
黄 昆	214

北京 SARS 疫情走势的模型分析与预测	
王正行 张建玮 唐毅南	223

中国理论物理学家与生物学家结合的典范 ——回顾汤佩松和王竹溪先生对植物细胞 水分关系研究的历史性贡献(上)	
刘寄星	230

中国理论物理学家与生物学家结合的典范
——回顾汤佩松和王竹溪先生对植物细胞
水分关系研究的历史性贡献(下)

刘寄星 239

为了忘却的怀念
——回忆晚年的叶企孙

戴念祖 251

从分子生物学的历程看学科交叉
——纪念金螺旋论文发表 50 周年

赵凯华 262

我与物理

厚美瑛 282

美丽是可以表述的
——描述花卉形态的数理方程

翁羽翔 287

外公丰子恺先生鼓励我学物理

宋菲君 303

爱因斯坦:邮票上的画传

秦克诚 306

转瞬九十载

王明贞 318

一本培养了几代物理学家的经典著作
——评《晶格动力学理论》

朱邦芬 333

介电体超品格的研究

闵乃本 朱永元 祝世宁 陆亚林 陆延青 陈延峰 王振林 王慧田 何京良 338

我国磁约束聚变研究的早期历史

王 龙 钱尚介 郑春开 陆全康 354

趣谈球类运动的物理

阎守胜 362

朗道百年

郝柏林 376

以天之语,解物之道

李政道 387

软物质物理

——物理学的新学科

陆坤权 刘寄星 397

宇宙学这 80 年

俞允强 413

熵非熵

——the Myth of Entropy

曹则贤 422

物理学中的演生现象

张广铭 于 涿 434

书山有路勤为径 悟后起修真功夫

——访赵凯华教授

王进萍 446

普渡琐记

——从 2010 年诺贝尔化学奖谈起

林志忠 456

我的学习与研究经历

杨振宁 461

后 记

《岁月留痕——〈物理〉四十年集萃》编辑委员会 475

2.5 埃分辨率胰岛素晶体结构的研究

胰岛素结构研究组

摘要

用 X 射线衍射法测定了猪胰岛素三方二锌晶体结构. 所需相角数据是用多对同晶置换加反常散射法计算的. 得到了令人满意的 2.5 Å 分辨率电子密度图, 显示出胰岛素分子结构的许多细节. 与 1969 年英国牛津小组发表的结果作了比较, 其中 A₁₂ 至 A₁₈ 的构型及联结胰岛素六聚体的两个锌离子间的距离有显著差别.

一、引言

伟大导师恩格斯在《反杜林论》一书中指出:“生命是蛋白体的存在方式.”现在已知,无论在什么地方,生命总是与蛋白质和核酸这两类基本物质相联系的.因此,开展蛋白质与核酸的研究工作具有重大意义.在我们伟大领袖毛主席和党中央的亲切关怀下,我国科学工作者高举毛泽东思想伟大红旗,于 1965 年 9 月,在世界上首次用化学方法全合成了具有全部生物活力的蛋白质——结晶牛胰岛素^[1].人工合成蛋白质的成功,标志着人类在认识生命、揭开生命奥秘的伟大历程中又迈进了一大步;同时,也有力地推动了我国对蛋白质和核酸的研究.测定胰岛素晶体结构的课题就是在这一基础上提出的.我们希望,胰岛

素空间结构的测定,能有助于深入研究它的生物化学性质及其在机体内调节新陈代谢的作用原理.

在毛主席革命路线指引下,从 1967 年夏开始,我们在条件和经验都很不够的情况下,逐步建立了必需的实验与分析技术,制备出几个质量较好的胰岛素重原子衍生物,解决了测定胰岛素晶体结构的关键问题.1970 年 9 月,我们先得到了 4 Å 分辨率的结果,接着在 1971 年 1 月得到了 2.5 Å 分辨率的结果;经过进一步修正和完善,在中国共产党诞生五十周年的前夕,胜利完成了 2.5 Å 分辨率的全部研究工作.这是一项社会主义大协作的成果,本工作是在中国科学院物理研究所进行的,参加这项工作的有中国科学院物理研究所、生物物理研究所、上海生物化学研究所和北京大学,先后参加过这项工作的还有

本书编者注:本文发表于《物理》1972 年第 1 期.

中国科学院原计算技术研究所、上海有机化学研究所和华东物质结构研究所。

天然胰岛素的结晶首先是由阿贝尔(J. J. Abel)于1926年获得的^[2]。英国牛津大学霍奇金(D. C. Hodgkin)教授等从三十年代开始测定胰岛素三方二锌晶体的结构。美国哥伦比亚大学劳(B. W. Low)等对无锌胰岛素正交晶体的结构也进行了多年研究。牛津小组曾于1969年11月初步报道了2.8 Å分辨率的研究结果^[3]。

二、方法

1. 重原子衍生物的制备

在前期工作中,我们曾对胰岛素多种晶系的晶体作过一些研究。鉴于三方二锌猪胰岛素晶体容易长大,也较稳定,适于制备重原子衍生物,我们选定它作为结构测定对象。研究用的猪胰岛素制剂是由上海生物化学制药厂、北京大学制药厂和武汉制药厂提供的。

三方二锌晶体所属空间群为 $R\bar{3}$ 。每个 R 格子晶胞含六个胰岛素分子和两个锌离子;每个结晶学不对称单位含两个胰岛素分子。 H 格子晶胞参数为 $a_H = 82.7 \text{ Å}$; $c_H = 34.0 \text{ Å}$ 。

同晶置换法^[4]所需重原子衍生物是我们自己制备的。几年来,我们曾较为系统地探索过用化学反应的方法制备胰岛素的重原子衍生物,迄今没有取得成功。我们现在使用的胰岛素重原子衍生物,是参照希里克儒尔(J. Schlichtkrull)给出的

条件^[5],先获得足够大的单晶后,用浸泡法制得的。浸泡采用0.05 M 醋酸缓冲液。

牛津小组在1966年和1967年曾报道过他们用浸泡法制备了脱锌加铅胰岛素等重原子衍生物^[6,7]。我们在开始工作时,注意到了这些报道。经过一系列实验和分析,我们发现,铅离子直接泡入二锌胰岛素晶体所引起衍射强度的变化与脱锌加铅基本上是一样的;而由于用络合剂EDTA脱锌这一步对晶体质量有影响,所以我们选用直接引进铅离子的胰岛素重原子衍生物(铅-胰岛素)作为分析对象,确定了它的重原子参数。

伟大领袖毛主席指出:“在生产斗争和科学实验范围内,人类总是不断发展的,自然界也总是不断发展的,永远不会停止在一个水平上。”我们经常学习这一教导,不断探索新的重原子衍生物。早期的实验表明,汞离子(Hg^{++})对胰岛素晶体作用强烈,只要极微量(十万分之几克分子浓度),就足以破坏晶体。这启示我们,合成一些汞的化合物,适当减小其被络合能力,可能是有希望的。事实上,在测定其他许多蛋白质的晶体结构时,汞化物的应用常常很成功。较为系统的研究使我们找到了一个很好的试剂——汞(I)。用汞(I)浸泡胰岛素晶体得到的衍生物——汞(I)-胰岛素,分辨率比母体还高,衍射强度变化大,晶体质量好,在我们的结构测定中起了主要作用。

在确定了上述两个重原子衍生物的重原子参数后,我们发现,铅-胰岛素中最主要一套重原子的坐标

与汞(Ⅰ)-胰岛素中重原子坐标之间最小距离只有 $4 \text{ \AA}$ 左右. 我们考虑, 如果把这两种试剂引入同一晶体, 由于重原子相距较近, 就可能发生相互影响, 打破原来的平衡关系, 产生某些新的衍射特点. 据此, 我们设计了一系列实验, 用一个与汞(Ⅰ)相似的试剂汞(Ⅱ), 同铅离子一起引入胰岛素晶体, 获得了汞(Ⅱ)-铅-胰岛素, 基本上证实了我们原先的设想. 三个重原子衍生物的制备条件见表 1.

除上面提到的三个衍生物外, 我们还得到了铀盐胰岛素等十几个重原子衍生物, 它们均因质量较差而未予利用.

计算结果表明, 所用的三个衍生物质量是好的, 这使我们得到了一套令人满意的 $2.5 \text{ \AA}$ 分辨率电子密度图. 在建立了胰岛素分子的立体结构模型后, 可以看出重原子在胰岛素晶体中的络合点是合理的.

它们分布在两个区域: 一个是在三重轴周围, 由 B_{13} 谷氨酸和 B_{10} 组氨酸、 B_9 丝氨酸等残基组成的极性空腔; 另一个是在六聚体表面, 由 A_{17} 谷氨酸、 A_4 谷氨酸残基以及 B 链末端氨基等组成的稍拥挤的空间. 两套汞原子的位置, 满足非结晶学二重对称, 有 B_{13} 谷氨酸羧基氧和 B_{10} 组氨酸咪唑环上的第五位氮参与配位, 附近环境也十分理想, 足以说明这个衍生物质量的优越. 铅原子的分布对非结晶学二重对称有显著偏离, 位置均在一些羧基附近. 其中最主要的一套在 B_{13} 谷氨酸羧基的另一个氧附近, 这可以说明汞与铅之间的竞争络合现象. 由于与铅离子络合的某些羧基可能参与晶体中次级键的形成, 因此铅离子的进入对晶体结构会有一些影响. 实验表明, 当铅离子的浸泡浓度进一步提高时, 对晶体有些破坏作用.

表 1 重原子衍生物制备条件

样 品 名 称	试 剂	
铅-胰岛素	$PbAC_2$	10^{-2} M , pH 5.65, 三天
汞(Ⅰ)-胰岛素	CH_3CH_2HgCl	$8 \times 10^{-4} \text{ M}$, pH 6.38, 两周
汞(Ⅱ)-铅-胰岛素	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \diagdown \\ CHHgCl \\ \diagup \\ CH_3 \end{array}$	汞(Ⅱ) $8 \times 10^{-4} \text{ M}$, pH 6.38, 先泡十一天;
	$PbAC_2$	汞(Ⅱ) $8 \times 10^{-4} \text{ M}$ 与铅 10^{-2} M 混合液, pH 5.65, 续泡三天

2. 衍射强度数据的收集和处理

胰岛素晶体及其重原子衍生物晶体的三维衍射强度数据是在线性衍射仪上, 用 CuK_{α} 射线, 以 c_0 轴为旋转轴, 分层收集的. 考虑到对 c 方向三个等效衍射点强度数据取平均值, 不仅能减小计数等实验误差,

而且对 $R3$ 空间群还能初步校正晶体对 X 射线的吸收. 因此, 对母体收了半球数据, 对衍生物收了全球数据. $2.5 \text{ \AA}$ 分辨率的独立衍射点共计 3 062 个. 反常散射数据收自同一个晶体. 收集数据时, 每个晶体衍射强度的衰减量控制在 15% 以

下.为了统一和补充,还收集了部分以 a_0 轴为旋转轴的数据.

衍射强度数据经过 L_p 因子、吸收因子(从实验吸收曲线近似求得)校正,并在对等效衍射点数据取平均后,依据 a_0 方向数据对 c_0 方向各层数据进行统一,得到母体的结构振幅 F_P .

对于衍生物的衍射数据,在上述处理的基础上,又根据统计原理,采取了“对应层靠拢”措施,使得每

一层强度的总和同另一半球对应层强度的总和相等.

实践是检验真理的标准.我们对所用衍生物的 $hk0$ 反常散射数据(同一层数据,不需统一)进行了考察,结果列于表 2. 从表 2 可以看出

$$\frac{\sum_{hk} F^2(hk0)}{\sum_{hk} F^2(\bar{h}\bar{k}0)} \approx 1,$$

表 2 各衍生物的 $\sum_{hk} F^2(hk0) / \sum_{hk} F^2(\bar{h}\bar{k}0)$

分辨率 衍生物	4 Å(65 个衍射点)	2.5 Å(171 个衍射点)
汞(I)-胰岛素	1.041	1.004
铅-胰岛素	1.015	1.011
汞(II)-铅-胰岛素	1.032	1.016

而且衍射点数越多越接近于 1. 因此,采取“对应层靠拢”方法是可行的,这有利于提高反常散射数据的质量.

为统一到母体数据的水准,衍生物数据经母体与衍生物温度因子差值 B^* 的校正(即乘以 $e^{-B^* \sin^2 \theta / \lambda^2}$,

B^* 用威尔逊(Willson)方法求出,汞(I)-胰岛素、铅-胰岛素和汞(II)-铅-胰岛素的 B^* 分别为 2.8 Å^2 , -1.7 Å^2 和 2.5 Å^2),然后乘以按下式求出的衍生物和母体的比例因子的比值(k_{HP}/k_P),最后得到衍生物的结构振幅 F_{HP} :

$$\frac{k_{HP}}{k_P} = 2 \frac{\sum_{hkl} F'_{HP} F_P}{\sum_{hkl} F'^2_{HP}} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{3}{4} \frac{\sum_{hkl} F_P^2 \sum_{hkl} F'^2_{HP}}{\left(\sum_{hkl} F_P F'_{HP} \right)^2} \right]^{1/2} \right\},$$

式中 F'_{HP} 是未校(k_{HP}/k_P)的衍生物结构振幅.

3. 重原子位置的确定

汞(I)-胰岛素和铅-胰岛素的重原子位置是通过 4 Å 三维差值帕特逊(Patterson)图的分析确定的.

分析表明,汞(I)-胰岛素晶胞中每个不对称单位的重原子位置只有两个,占有率较高,不仅在以 F_H^2 (联合同晶和反常强度两种差值计算得到^[8])为系数的帕特逊图中,而且在系数为 $(F_{HP} - F_P)^2$ 的“同晶”差值帕特逊图及系数为 $(F(+)-F(-))^2$ 的“反