

ОРГАНИЗАТОРЫ:

Национальный комитет кристаллографов России

Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт»

Федеральный научно-исследовательский
центр «Кристаллография и
фотоника» РАН

2016



1 РОССИЙСКИЙ
КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ
КОНГРЕСС

ПЕРВЫЙ РОССИЙСКИЙ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЙ КОНГРЕСС

**От конвергенции наук
к природоподобным технологиям**

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

**ПРЕДСЕДАТЕЛЬ КОНГРЕССА
М.В. Ковальчук**



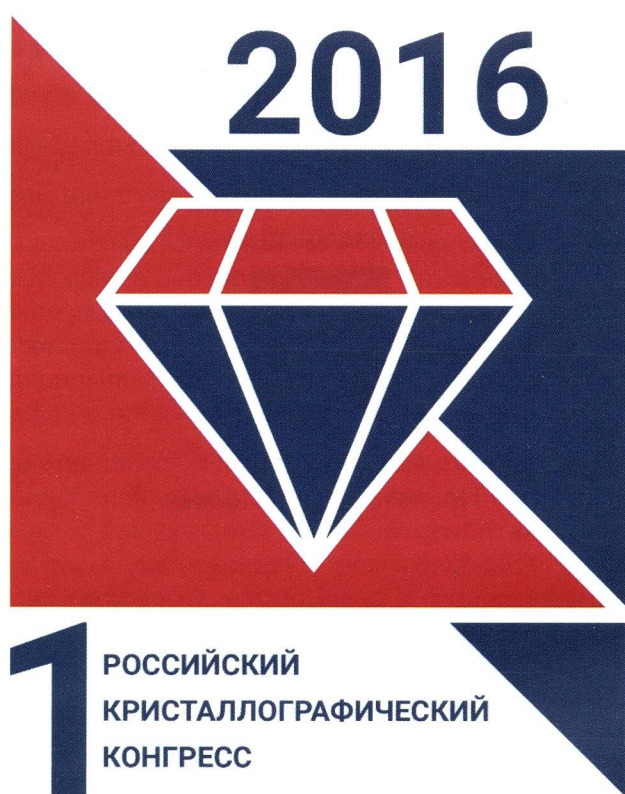
Москва, ВДНХ
21–26 ноября 2016 г.

Национальный комитет кристаллографов России

Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт»

Федеральный научно-исследовательский центр
«Кристаллография и фотоника» РАН

**Сборник тезисов
Первого Российского кристаллографического конгресса**



21 – 26 ноября 2016

г. Москва

**ДИФРАКЦИОННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ С
ПИКОСЕКУНДНЫМ ВРЕМЕННЫМ
РАЗРЕШЕНИЕМ НА КАНАЛЕ
СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВЭПП-4
ИЯФ СО РАН: ЛАЗЕРНЫЙ НАГРЕВ, УДАРНЫЕ
ВОЛНЫ, ДЕТОНАЦИЯ**

Толочко Б.П.^{1,3}, Аульченко В.М.³, Евдоков О.В.¹, Тен К.А.²,
Косов А.В.³, Аракчеев А.С.³, Назьмов В.П.³, Шехтман Л.И.³,
Жуланов В.В.³, Прууэл Э.Р.², Бурдаков А.В.³, Золотарев К.В.³,
Кулипанов Г.Н.³

¹ *Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН*

² *Институт гидродинамики им. М.А.Лаврентьева СО РАН*

³ *Институт ядерной физики им. Г.И.Будкера СО РАН*
e-mail: B.P.Tolochko@inp.nsk.su

Разрабатываемая аппаратура предназначена для исследования быстропротекающих процессов в твердом теле, сопряженных с изменением кристаллической решетки [1]: превращение графита в алмаз, процессов, происходящих при ударе метеорита о корпус космического корабля или при сбросе плазмы на стенку термоядерного реактора. Исследуются процессы, информацию о которых нужно знать для изготовления техники нового поколения. Проблема в том, что новые изделия работают в экстремальных, ранее недостижимых условиях, а поведение материалов в этих условиях неизвестно.

Для реализации рентгеновского дифракционного эксперимента с пикосекундным временным разрешением на канале синхротронного излучения (СИ) № 8 ВЭПП-4 установлены станции «Детонация» и «Плазма». Генерация СИ осуществляется 7-ми полюсной змейкой с полем 1,3 Т. Энергия электронов 4,1 ГэВ, длительность банча 73 пс. Такие параметры генерации СИ позволяют исследовать процессы с высоким, пикосекундным временным разрешением. Для канала разработана рентгеновская оптика на базе 150000 элементов с использованием LIGA технологии, которая позволяет фокусировать пучок СИ до микронных размеров. Регистрация дифрактограмм осуществляется детектором DIMEX [2] с экспозицией 73 пс.

[1] Базаров Ю.Б., Губачев В.А., и др. Невозмущающие методы диагностики быстропротекающих процессов/ Под ред. А.Л.Михайлова. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2015. – 322 с.

[2] Shekhtman, L.I., Aulchenko, V.M., et al/ *Journal of Instrumentation*, 2012, 7 (3), C03021.

**СТАНЦИЯ СТРУКТУРНОГО
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ КУРЧАТОВОГО
ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ**

Тригуб А.Л., Велигжанин А.А., Зубавичус Я.В.,
НИЦ «Курчатовский институт»

Станция Структурного материаловедения расположена на канале 1.36 Курчатовского синхротронного излучения и ориентирована на исследование структурных особенностей функциональных материалов с характерными размерами от единиц до десятков нанометров. Широкий диапазон структурных особенностей, изучаемых на станции определяется реализованными методами рентгеновской спектроскопии поглощения (XANES), дифракционные методы (SAXS, XRD) позволяет реконструировать локальную атомную структуру около поглощающего атома, XANES спектр предоставляет информацию о геометрии атомного окружения, электронная структура поглощающего атома, порошковая рентгеновская дифракция (XRD) позволяет проводить фазовый анализ, а также идентифицировать кристаллических структур по методу Ритвельда. Малоуглового рассеяния служит для определения размера и форм наночастиц. Помимо наличия ряда современных методов на станции имеется оборудование для проведения in-situ экспериментов, т.е. создание на образце температур от 5К до 1000оС, специализированных камер. Регистрация рентгеновских спектров и дифракции совместно с варьированием температуры и состава газовой среды в камере образца позволяют исследовать структурные изменения в образце и изменения электронной структуры поглощающих атомов.

Благодаря широким возможностям станции решается целый ряд структурных задач по исследованию катализаторов, функциональных наноматериалов, перспективных магнитных металлоорганических комплексов и других объектов.

МИКРОКАПСУЛЫ ДЛЯ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ СЛОЕВ

Васильева А.А.^{1,2}, Боролдина Т.Н.², Марченко И.В.^{1,2},

Трушина Д.Б.^{1,2}

¹ «Курчатовский институт»

² «Физико-химическая микробиология им. А.В. Шубникова ФНИИ

«Физическая химия и фотоника» РАН

e-mail: bukreeva@crys.ras.ru

Микрокапсулы, получаемые последовательной адсорпцией противоположно заряженных полимеров на коллоидные частицы-темплаты, образуют многофункциональную систему доставки лекарственных веществ. В работе описаны капсулы карбоната кальция с различными размерами и более подходящих темплатов для доставки благодаря своим физико-химическим свойствам. В данной работе показана возможность доставки таких частиц в широком диапазоне температур, изучены особенности их структуры. В работе описаны полиэлектролитные капсулы из полиакрилатов со средним диаметром менее 100 нм из частиц карбоната кальция с индуцированным сжатием оболочки. В работе описаны методы модификации полиэлектролитных капсул ионами металлов и оксидов металлов, а также наличие красителей, что позволяет осуществлять адресную доставку капсулами под действием внешнего поля и разрушение оболочек капсул с помощью ультразвука. Предложен новый подход к созданию «умных» и микроконтейнеров для доставки биологически активных соединений на основе полимеров с применением низкочастотного ультразвука для образования оболочки контейнеров с учетом физико-химических взаимодействий на границе фаз масло/вода, индуцированных ультразвуком.

НАНОСТРУКТУРНЫЙ МЕХАНИЗМ МОДИФИКАЦИОННОЙ АДАПТАЦИИ ПРОТЕОГЛИКАНОВЫХ СИСТЕМ БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙ И СЛИЗЕЙ

Вазина А.А.¹, Васильев В.Д.², Васильева А.А.¹,
Васильченко В.А.³, Забелин А.В.⁴, Кваша М.С.⁵,
Корнеев В.Н.⁶, Кулипанов Г.Н.⁷, Ланина Н.Ф.¹,
Маринский Г.С.³, Подпратов С.Е.³, Подпратов С.С.³,
Шелестов В.М.¹, Шлектарев В.А.¹

¹ Институт теоретической и экспериментальной
биофизики РАН

² Институт белка РАН

³ Институт электросварки им. Е.О. Патона НАН
Украины

⁴ НИЦ «Курчатовский институт»

⁵ Институт нейрохирургии им. А.П. Ромоданова

⁶ Институт биофизики клетки РАН

⁷ Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН
vazina@mail.ru

Концептуальная революция в области изучения принципов наноструктурной организации вещества обусловлена инструментальной революцией, связанной с развитием новых структурно-физических методов на основе светосильного излучения ускорителей. Представлены экспериментальные результаты многолетних рентгенодифракционных исследований структурной организации биологических тканей человека и животных в различных физиологических состояниях, включая онкотрансформацию. На высокоупорядоченных дифракционных картинах слизей и эпителиальных тканей зарегистрированы многочисленные порядки дебаевских колец с основным периодом $4.65(\pm 0.15)$ нм, который атрибутирован к протеогликановым системам межклеточного матрикса различных тканей; экспериментально показана наноинвариантность периодичности в широком эволюционном ряду. Выявлена наноструктурная трансформация протеогликановых систем ткани при синергетическом воздействии высокочастотной электрохирургической сварки (изменение температуры, геометрия инструментария, давление, модуляция электромагнитного поля), широко используемой нами в различных клинических операциях. В рамках статистической физики сетчатых полимеров протеогликаны рассматриваются как лабильные системы, способные обеспечить модификационную адаптацию за счет образования обратимых хелатных комплексов с катионами кальция.

Работы поддержаны грантом РФФИ 14-44-03667.

**МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И
ПРОБЛЕМА РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ
РАССЕЯНИЯ НА НЕРЕГУЛЯРНЫХ
БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ В
ЭКСПЕРИМЕНТАХ НА РЕНТГЕНОВСКИХ
ЛАЗЕРАХ**

Шайтан К.В.

МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва 119991

e-mail: Shaytan49@yandex.ru

Создание рентгеновских лазеров на свободных электронах и соответствующей техники измерения рассеяния рентгеновских квантов на нерегулярных биологических объектах (единичные макромолекулы, их комплексы и клеточные структуры) в перспективе могут открыть новую эру в структурной биологии – изучение структуры и динамики биомолекул *in vivo* (в живой клетке). Необходимым условием для этого является наличие инструментов для обработки картины рассеяния и выделения структурной информации из получаемых практически мгновенных “фотографий” объекта с варьируемой временной задержкой. Ценность такой биологической информации трудно переоценить. До настоящего момента наши знания о структуре белков и динамике функционального акта ограничены экспериментами, в которых объект выделен из естественной среды (клетки) и переведен в специальные условия, диктуемые требованиями физического метода. Переход к получению структурной информации *in vivo* потребует решения сложной обратной задачи рассеяния, для регуляризации которой необходимо выполнить целый комплекс теоретических работ и развить соответствующие математические методы. Отметим в их числе:

- предсказание с достаточно высокой степенью точности (порядка 70-80%) структур белков (и других биополимеров) как по основной последовательности, так и по вариации структуры по сравнению, например, с кристаллической при условии помещения в комплекс или клеточное окружение;

- методы фильтрации картины рассеяния для выделения сигнала от структур с близкой геометрией (или конформацией).

Не имея возможности подробно останавливаться на достаточно обширном комплексе задач заметим, что одним из узких и ресурсоемких мест для развития инструментов регуляризации обратной задачи рассеяния в обсуждаемом контексте является моделирование вероятных структур белков (других биополимеров и их комплексов) с приемлемой точностью. Здесь возможно, в частности, использование методов моделирования структуры по гомологии. Но эти методы не применимы для негомологичных белков и для оценки вариации структуры при изменении условий. Наиболее прямую и ценную в этом плане информацию дают методы молекулярной динамики, развитие которых в направлении решения задач фолдинга (сворачивания биополимеров в работоспособную пространственную структуру) демонстрирует обнадеживающие перспективы.

Автор признателен М.П.Кирпичникову и А.Т.Фоменко за полезные обсуждения и поддержку. Работа выполнена

при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (уникальный идентификатор проекта RFMEFI61614X0003).

**РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЖЕСТКОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ.**

ПЕРВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ В СЦСТИ

Шмаков А.Н.^{1,2,3}, Винокуров З.С.¹, Селютин А.Г.¹, Кулер К.Э.²

¹ Институт катализа им.Г.К.Борескова СО РАН

² Институт ядерной физики им.Г.И.Будкера СО РАН

³ Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
e-mail: A.N.Shmakov@inp.nsk.su

Использование жесткого рентгеновского излучения с энергией квантов 40÷100 кэВ в рентгеноструктурном анализе имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционно используемым сравнительно мягким излучением с энергией ~8÷20 кэВ. Во-первых, в случае жесткого излучения уменьшаются углы дифракции, и основная часть структурной информации оказывается заключенной в небольшом угловом интервале. Например, при энергии излучения ~60 кэВ диапазон векторов рассеяния $4\sin^2\theta/\lambda$ в интервале углов дифракции $2\theta \sim 20^\circ$ составляет ~100 нм⁻¹, что превышает диапазон углов, в котором может быть зарегистрирована дифракционная картина при энергии фотонов ~8 кэВ. Во-вторых, существенно возрастает проникающая способность излучения с высокой энергией, что позволяет получать рентгенограммы образцов, находящихся внутри различных устройств, например, в камерах высокого давления, электрохимических ячейках, автоклавах и т.д. В-третьих, широкий диапазон векторов рассеяния, обеспечиваемый коротковолновым излучением, дает возможность применения метода интегрального анализа дифракционной картины, т.е. получения функций радиального распределения электронной плотности. В этом случае с ростом энергии излучения повышается разрешающая способность и чувствительность метода. Наконец, в-четвертых, в области энергий ~80÷100 кэВ лежат *K*-края поглощения тяжелых элементов, таких как Pt и Au, и появляется возможность использования в дифракционных исследованиях резонансных эффектов вблизи *K*-края поглощения этих элементов.

В Сибирском Центре Синхротронного и Терагерцового Излучения (СЦСТИ) на накопителе электронов ВЭПП-4 были проведены первые эксперименты по дифракции с использованием излучения с энергией квантов ~55 кэВ. Были получены рентгенограммы стандартного образца SRM676 (корунд), а также ряда образцов различного состава. Для стандартного образца корунда была получена функция радиального распределения электронной плотности. В докладе обсуждаются результаты первых экспериментов, а также перспективы использования жесткого излучения для проведения исследований методом рентгеновской дифракции *In Situ* и *Operando*.

Сборник тезисов Первого Российского кристаллографического конгресса
21 – 26 ноября 2016

Председатель Конгресса

Ковальчук М.В.

Составители

Алексеева О.А., Благов А.Е., Волошин А.Э., Демин В.А., Дьякова Ю.А., Каблов Е.Н.,
Каневский В.М., Кашкаров П.К., Кирпичников М.П., Марченкова М.А., Нарайкин О.С.,
Овчинникова Е.И., Попов В.О., Терещенко Е.Ю., Штыкова Э.В., Яцишина Е.Б.

Материалы публикуются в авторской редакции методом прямого копирования.

Отпечатано в ООО «Издательско-полиграфический комплекс «НП-Принт»
190005, СПб, Измайловский пр., д.29

Тираж 1000 экз.