

«Структурная диагностика»: задачи станции СКИФ в биологии, медицине и исследовании функциональных материалов

«Структурная диагностика» — одна из станций первой очереди Центра коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» (ЦКП СКИФ). Она предназначена для решения научно-исследовательских и прикладных задач, связанных с использованием методов рентгеновской дифракции в области водородной энергетики, химического катализа, для создания топливных элементов, новых материалов и покрытий. Помимо этого, здесь будут проводить исследования белковых кристаллов и высокомолекулярных белков для создания новых лекарственных средств.

Инициатором создания станции стал Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН». Разработкой оборудования станции занимается ИИИТомск (Институт сильноточной электроники СО РАН (Томск) совместно с Томским политехническим университетом, Новосибирским государственным техническим университетом, Балтийским федеральным университетом им. Иммануила Канта (Калининград).

«Создание станции — сложная инженерная и научная задача. Компетенциями и ресурсами для этого полностью своими силами не обладает ни одна организация. На текущий момент основная работа проводится сотрудниками ИК СО РАН и ИСЭ СО РАН. Сотрудники Института катализа разработали техническое задание и оптическую схему станции, а мы занялись проектной документацией и изготовлением оборудования», — рассказал руководитель работ по созданию станции, заведующий лабораторией пучково-плазменной инженерии поверхности ИСЭ СО РАН кандидат технических наук **Владимир Викторович Денисов**.

Сотрудники ИК СО РАН имеют многолетний опыт в использовании источников синхротронного излучения, как на установках внутри России, так и на международных. Это и источник в Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, и «КИСИ-Курчатов», и мировые синхротронные центры: ESRF (Франция), DESY (Германия), DIAMOND Light Source (Великобритания). Концепция станции сформировалась на основе опыта эксплуатации этих установок специалистами Института катализа, а также других ведущих российских и зарубежных экспертных групп.

Круг научных и прикладных задач станции включает исследование материалов для водородной энергетики и твердотельных топливных элементов, катализаторов для энергоэффективного катализа, нефтепереработки и экологических приложений, керамических и высокоэнергетических материалов, износостойких и коррозионно-стойких покрытий.

У ИСЭ СО РАН уже был опыт в разработке комплексного оборудования для проведения синхротронных исследований. Томский центр компетенций в области пучково-плазменной инженерии поверхности и синхротронных исследований построил уникальный комплекс ВЭИПС-1 для исследования функцио-

нальных структур и протестировал его в ИЯФ СО РАН.

«Наш институт координирует все активности по разработке и изготовлению узлов станции, начиная от подготовки эскизного проекта станции с 3D-моделями всех элементов и заканчивая сдачей всего экспериментального комплекса станции. В ИСЭ СО РАН изготавливают мониторы пучка, предназначенные для визуализации рентгеновского пучка, основные инженерные и вакуумные системы. Совместно с БФУ им. И. Канта мы занимаемся созданием рентгеновских трансфокаторов — устройств для фокусировки фотонного пучка на основе составных преломляющих линз из бериллия», — рассказал **Владимир Денисов**.

На станции будет несколько помещений, которые называются хатчами (от англ. *hutch* — бункер/хижина). Комната, где находится оптическое оборудование, называется оптический хатч. Там расположены оптические элементы, преобразующие пучок синхротронного излучения. Пространство, где проходят эксперименты, — экспериментальный хатч. Помимо этого — контрольная кабина, где находится персонал, пульт управления станцией, пульт для связи с центральными пультами ускорительного комплекса.

Уникальные параметры синхротронного излучения (СИ)кратно расширили область применения рентгеноструктурного анализа (РСА), позволили уменьшить размеры образцов и увеличить разрешающую способность метода. К свойствам и возможностям СИ можно отнести чрезвычайно высокую яркость источника. Это позволяет увеличить чувствительность и скорость измерений, дает возможность получить пучки монохроматических рентгеновских лучей с настраиваемой длиной волны. Кроме того, СИ имеет естественную высокую коллимированность (малую расходимость пучка, почти параллельность всех лучей) пучков рентгеновских лучей, что позволяет использовать составные преломляющие линзы как фокусирующие элементы без потери качества получаемых данных.

«Синхротронное излучение — это рентгеновское излучение, но значительно более яркое, чем генерируемое лабораторными источниками. Эксперименты, которые в лаборатории проводят в течение нескольких часов, здесь можно провести за несколько минут, десятков секунд. Та-

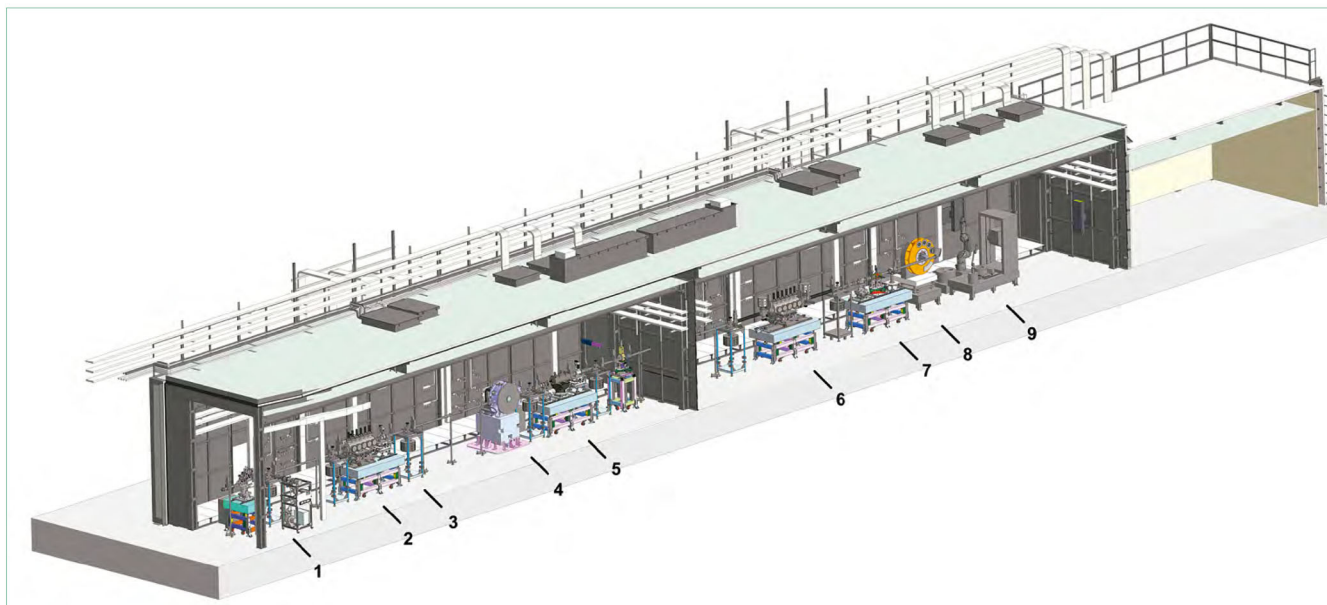
кое излучение позволяет получить более высокое пространственное и временное разрешение. В некоторых случаях состояние исследуемых объектов может меняться в течение нескольких часов, поэтому важна стабильность работы источника излучения и оптических элементов. Эти параметры синхротронных экспериментов, яркость и стабильность, позволяют проводить исследование *in situ*. Например, нагревается образец, и в режиме реального времени вы смотрите его состояние, фазовый состав, параметры микроstructures и можете определить закономерности фазовых превращений, при каких температурах и условиях исчезают одни фазы и образуются другие. Исходя из этой информации, вы можете понять механизмы, которые лежат в основе процессов модификации свойств исследуемого объекта, подобрать технологический режим, который инициирует процесс превращения», — сказал **Владимир Денисов**.

Синхротронные станции обычно состоят из трех частей: фронтенд, оптическая часть и экспериментальная. Фронтенд служит для разделения электронных и фотонных пучков, вакуумных объемов накопительного кольца и тракта станции, а также содержит устройства для безопасного вывода рентгеновского излучения в оптический хатч. Оптическая часть подготавливает (коллимирует, монохроматизирует и фокусирует) пучок рентгеновских фотонов к использованию в эксперименте. В экспериментальной части станции размещают дифрактометры, спектрометры и другое экспериментальное оборудование для проведения исследований. Для максимизации используемого пучкового времени и минимизации затрат на оптику на оптической линии стараются совместить несколько экспериментальных установок. Кроме этого, такая схема работы позволяет проводить исследование одного и того же образца разными методами, что расширяет экспериментальные возможности станции. На этой станции будут реализованы две экспериментальные установки: для исследования функциональных материалов методом порошковой дифракции высоко разрешения в условиях повышенных температур, газовых сред, а также для расшифровки белковых структур и макромолекулярных соединений методом рентгеноструктурного анализа монокристаллов при криогенных температурах.

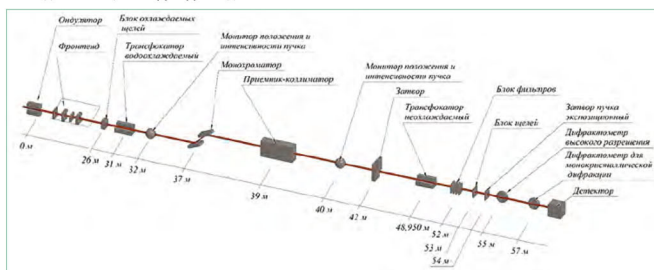
«Структурная диагностика» для функциональных материалов «Метод порошковой дифракции *in situ* (в режиме реального времени) подходит для решения множества исследовательских и технологических задач, например определения фазового состава, локальной атомной структуры, структурных превращений веществ и материалов. Станция позволит проводить исследования термической стабильности защитных и термобарьерных покрытий, отслеживать структурные изменения в материале аккумулятора прямо в ходе зарядки или разрядки. Помимо этого, можно будет изучать процессы активации и деградации катализаторов в процессе работы. С помощью пучков микронного размера станут возможны исследования конструкционных материалов, например картирование поля напряжений в структуре композита или сплава. Так, например, с использованием метода микродифракции на синхротроне удалось оценить дефектность ячейки солнечной батареи в месте спаики кремния и подложки, не разрушая ее саму. Полученные данные позволили определить причину разрушения таких батарей в процессе работы и оптимизировать процесс их производства для увеличения срока службы», — сказал координатор разработки и создания станции «Структурная диагностика», научный сотрудник ЦКП СКИФ **Захар Сергеевич Винокуров**.

Планируется, что на станциях первой и второй очереди ученые будут вести исследования по созданию новых конструкционных материалов для использования в авиации и космосе. Это жаропрочные и износостойкие покрытия, покрытия для лопаток турбин авиадвигателей, которые работают при криогенных температурах. Благодаря синхротронному излучению срок разработки и создания новых конструкционных материалов для работы в экстремальных условиях может снизиться от нескольких лет до нескольких месяцев.

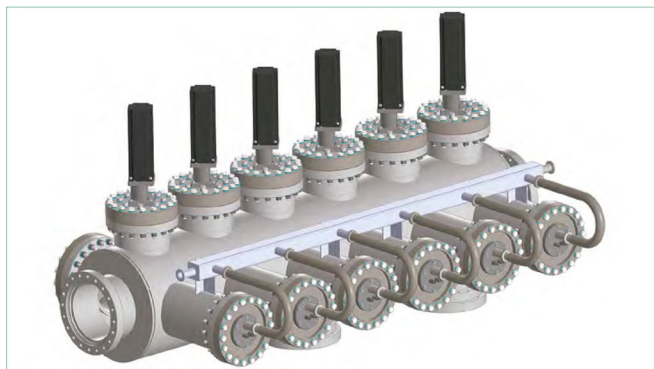
«Одна из важнейших задач — не просто узнать фазовый состав того или иного покрытия, но и понять, как влияет конкретный элемент на эксплуатационные свойства поверхности. На сегодняшний день без высокоточных методов СИ этого не сделать. Еще одна задача — определить условия и механизмы формирования разных фаз покрытия в ходе осаждения или модификации поверхности материала.



3D-модель станции «Структурная диагностика»



Оптическая схема станции «Структурная диагностика»



Модель трансформатора станции 1-2

Исследование структурных и фазовых превращений материалов и покрытий при высоких температурах проводится на специальном стенде, где образцы можно нагревать в вакууме или в необходимой атмосфере. Во время эксперимента съемка с поверхности образца происходит в режиме реального времени, благодаря чему мы можем увидеть малейшие изменения в рентгенограмме образца и зафиксировать их», — рассказал член научно-координационного совета ЦКП СКИФ президент Академии наук Республики Башкортостан профессор Уфимского университета науки и технологий, доктор технических наук Камилль Нуруллаевич Рамазанов.

«Структурная диагностика» для биологии и медицины

Вторая экспериментальная установка предназначена для макромолекулярной, или белковой, кристаллографии. Такие исследования важны для фармакологической промышленности. Для синтеза новых лекарственных препаратов необходимо

знать структурную формулу синтетических или природных соединений, чтобы ее получить, нужно превратить образец вещества в кристалл.

Здесь будут проводить исследования в области структурного материаловедения, а оборудование станции позволит делать эксперименты в условиях повышенных или криогенных температур, изучать кинетику протекающих процессов, отслеживать структурные характеристики и морфологию частиц.

«Метод макромолекулярной кристаллографии позволит получить структуры важных для фармакологии ферментов и рецепторов. Мы сможем перейти от дорогостоящего и времязатратного эмпирического получения новых лекарственных молекул к направленной модификации с помощью компьютерного моделирования. Кроме того, скорость и качество данных, полученных на современном синхротроне, позволяют очень быстро расшифровывать структуры молекул и в короткие сроки получить необходимую для дальнейшего исследования информацию о новом



Модель монитора пучка станции 1-2

синтезируемом препарате, веществе или вирусе. Так, например, первые данные по структуре вирусных белков SARS-CoV-2 были получены на китайском синхротроне SSRF уже через неделю после объявления об эпидемиологической угрозе. Данные были оперативно переданы научному сообществу всего мира, и в кратчайшие сроки с участием множества научных групп были разработаны противовирусные средства», — сказал Захар Винокуров.

Помимо этого, с помощью рентгеновской дифракции на монокристаллах было получено более 70 % белковых структур (~140 000 из ~190 000). Этот метод наиболее удобен и эффективен для установления пространственных структур белков. Также на станции планируется изучение зависимости структуры микрокристаллов магнитоактивных соединений от температуры, что является важным для технологических областей: хранения информации, спинтроники и квантовых компьютеров.

«По данным Управления по санитарному надзору за качеством пищевых продуктов и медикаментов США, за период

2010–2016 гг. из 210 лекарств, которые были разрешены к использованию, 184 получены с помощью знаний о структуре. Одно из таких характерных лекарств, которое было создано с помощью знаний о трехмерной структуре, — это ингибитор вирусного гепатита. До недавнего времени вирусный гепатит считался приговором, сейчас это вполне излечимая болезнь», — сказал исполняющий обязанности директора Института химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, руководитель Объединенного центра геномных, протеомных и метаболомных исследований ИХБФМ СО РАН кандидат химических наук Владимир Васильевич Коваль.

Сейчас завершен этап эскизного проектирования станции и идет этап разработки конструкторской документации. Его должны завершить в конце января 2024 года и приступить непосредственно к созданию оборудования станции.

Полина Щербакова
Иллюстрации предоставлены исследователями