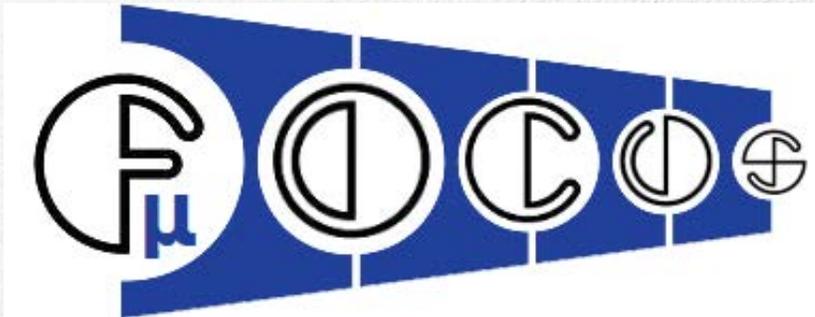




ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА  
им. Г.К. БОРЕСКОВА

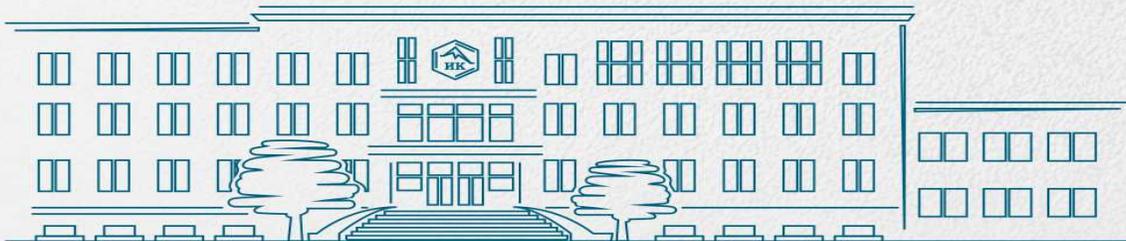


## Станция 1-1 «МИКРОФОКУС» ЦКП «СКИФ»



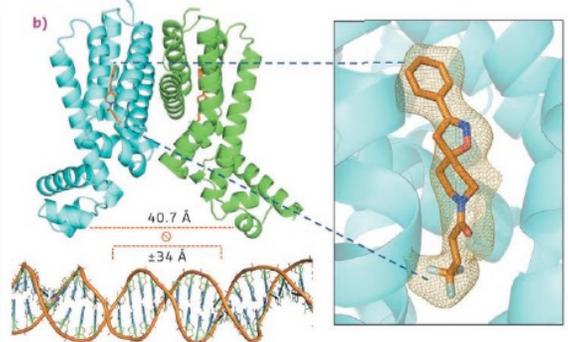
С.В. Ращенко  
М.Р. Шарафутдинов

С.Г. Архипов  
А.В. Дарьин  
Ф.А. Дарьин



к.х.н. Архипов Сергей Григорьевич ([arksergey@gmail.com](mailto:arksergey@gmail.com))

# БЛОКИ ЗАДАЧ



## Блок задач 1. Расшифровка структур биополимеров (ИХБФМ СО РАН, ИМКБ СО РАН, НГУ)

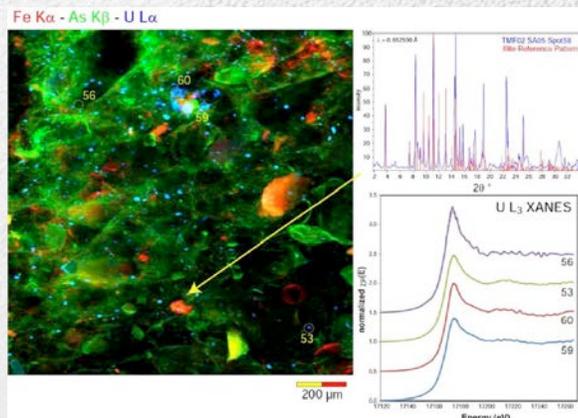
- Задача 1.1. Исследование белков, участвующих в репарации ДНК
- Задача 1.2. Исследование белков, используемых при редактировании генома
- Задача 1.3. Исследование комплексов ингибиторов систем репарации

## Блок задач 2. Создание новых материалов (ИК СО РАН, ИНХ СО РАН, НИОХ СО РАН, ИПХЭТ СО РАН, ИТПМ СО РАН, ИГМ СО РАН, ИГИЛ СО РАН, ИТФ СО РАН, ИФП СО РАН, ИХТТМ СО РАН, НГУ)

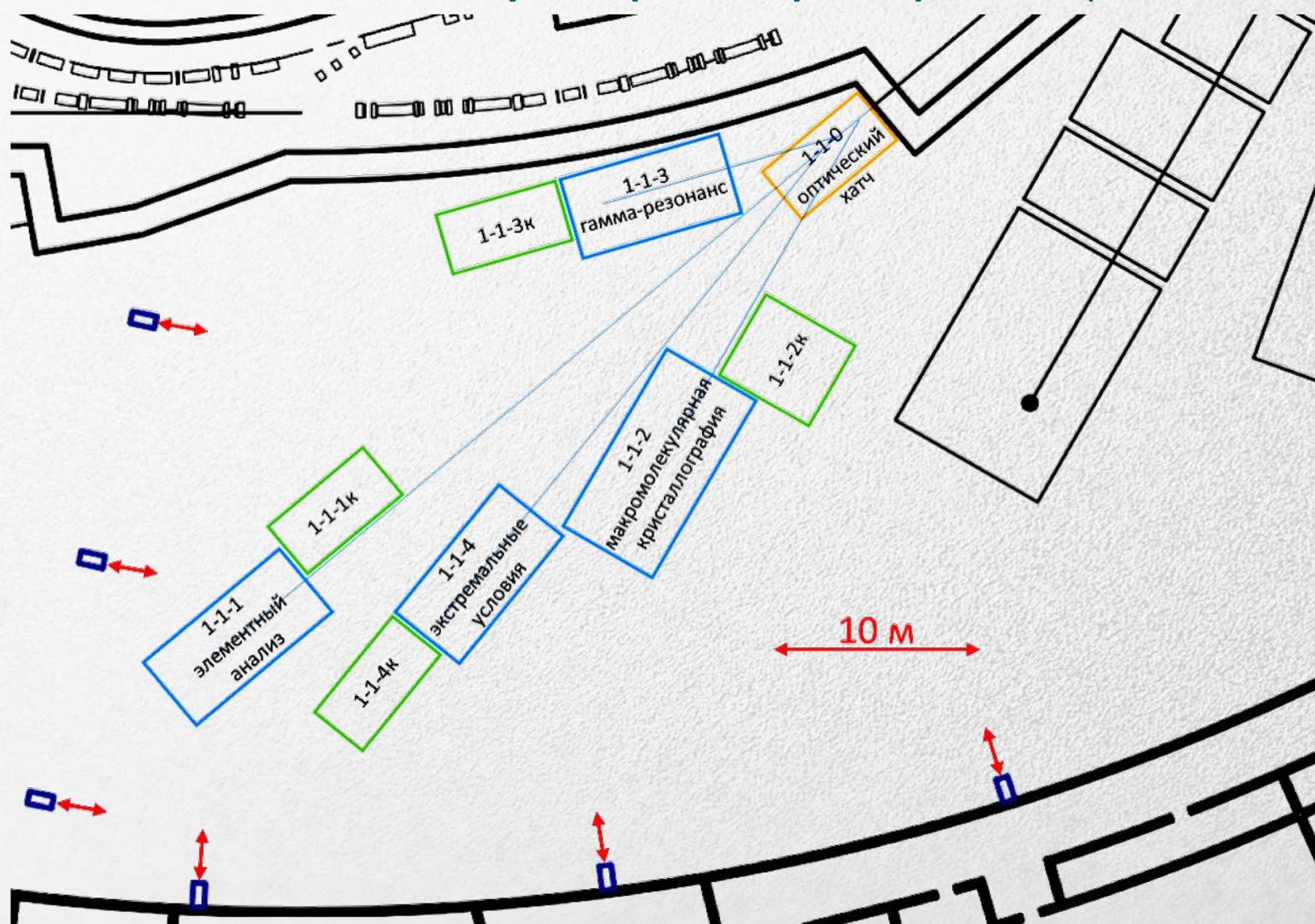
- Задача 2.1. Создание высокопрочных материалов авиационного назначения с помощью лазерных и аддитивных технологий
- Задача 2.2. Создание новых защитных покрытий методами плазменного и холодного газодинамического напыления
- Задача 2.3. Исследование новых полигидридных материалов
- Задача 2.4. Управление структурообразованием кристаллических фаз, в том числе с использованием переменных температур и давлений
- Задача 2.5. Фотокристаллографические исследования
- Задача 2.6. Исследования дефектных и напряженных кристаллов

## Блок задач 3. Исследование геоматериалов (ИГМ СО РАН)

- Задача 3.1. Изучение трудноизвлекаемых форм полезных ископаемых
- Задача 3.2. Анализ вариаций состава геоматериалов для задач экологии и климатологии
- Задача 3.3. Изучение геоматериалов под воздействием экстремальных условий
- Задача 3.4. Исследование включений в минералах



Композитные рефракционные линзы из берилля и алмаза (трансфокаторы) фокусируют пучок на образце до субмикронных размеров с сохранением когерентных свойств



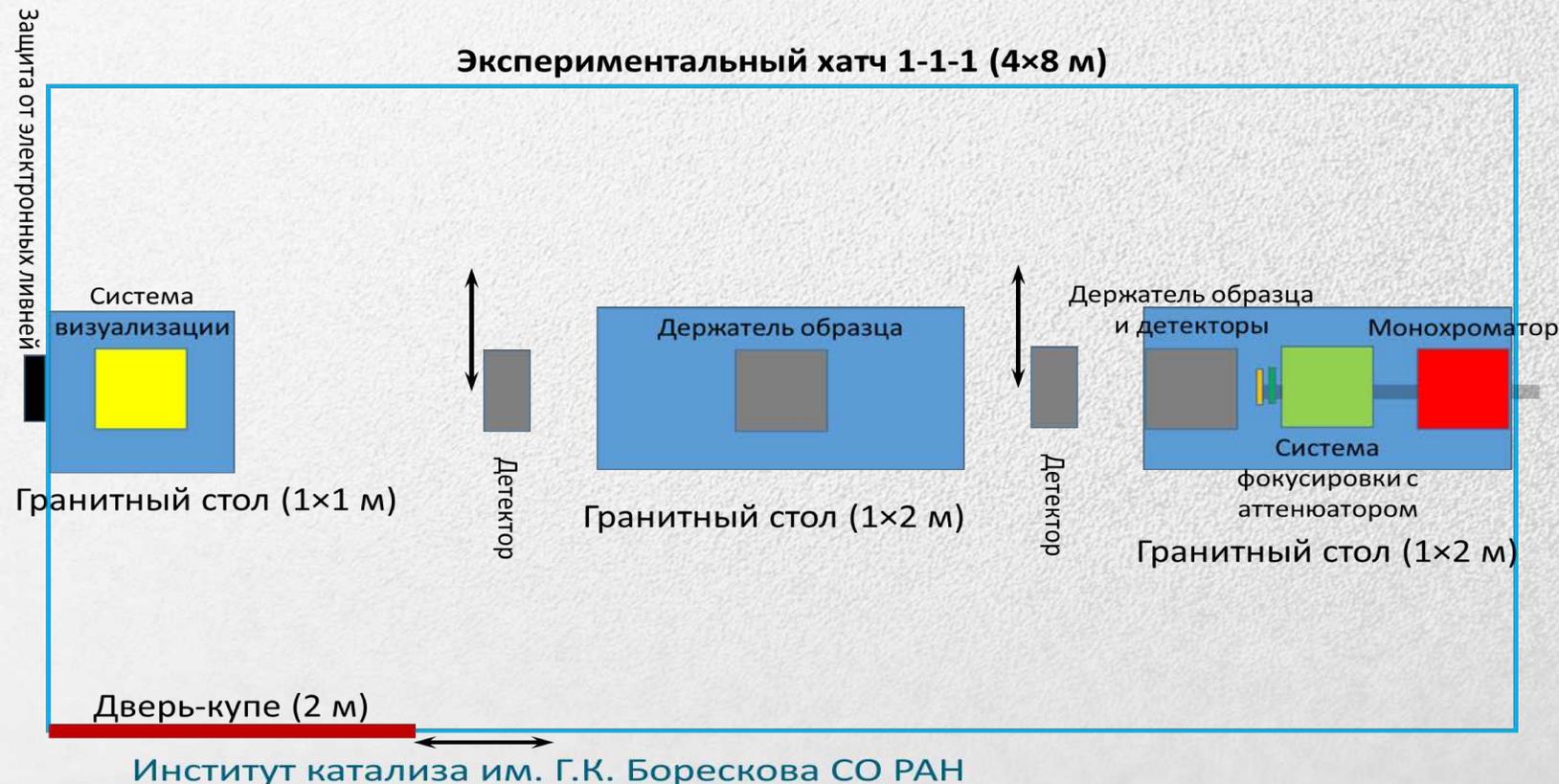
- Источник СИ сверхпроводящий ондулятор «№2»
- Период 18 мм, длина 2.3 м
- алмазные монохроматоры-расщепители пучка отводят рабочие гармоники
  - 14.4 кэВ – секция «Гамма-резонанс»
  - 17.0 кэВ – секция «Структурная биология»
  - 27.5 кэВ – секция «Экстремальное состояние»
  - Остальные – секция «Микро- и нанофокус»

# Секция 1-1-1 «Микро- и нанофокус»

Анализ химического состава и кристаллической структуры образца с разрешением до 100 нм

Планируется решение таких задач как:

- Исследование лазерных сварных соединений из высокопрочных сплавов
- Металлических и металлокерамических покрытий
- Пространственного распределения и дисперсности фаз при разработке технологий нанесения защитных покрытий



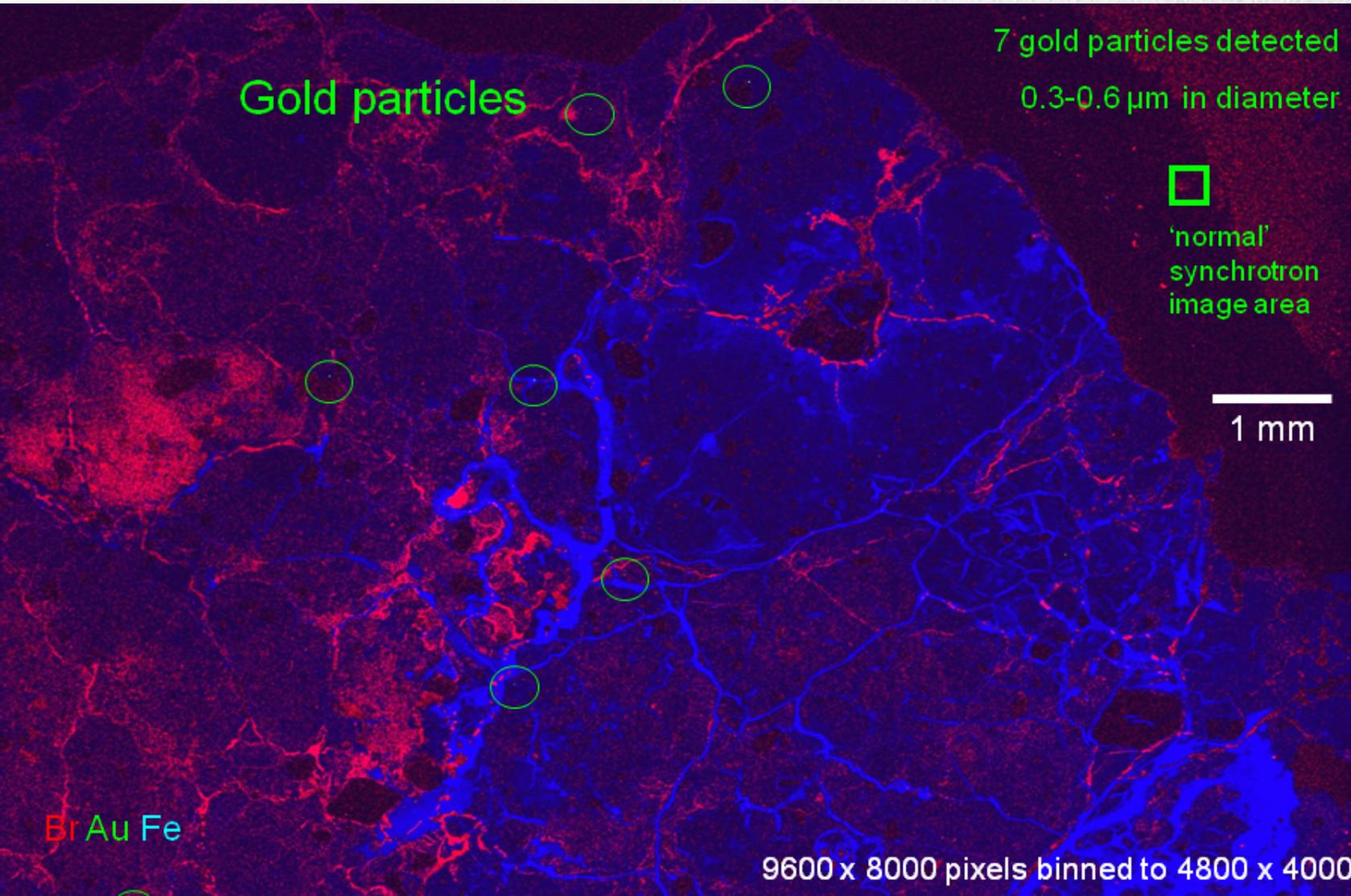
## Методы исследования

- Многоэлементный флуоресцентный анализ и картографирование с пространственным разрешением до 100 нм, совмещённые с рентгеновской дифракцией
- Флуоресцентная микротомография с усилением контраста благодаря выбору энергии вблизи краев поглощения

# Секция 1-1-1 «Микро- и нанофокус»

Анализ химического состава и кристаллической структуры образца с разрешением до 100 нм

## Элементный анализ



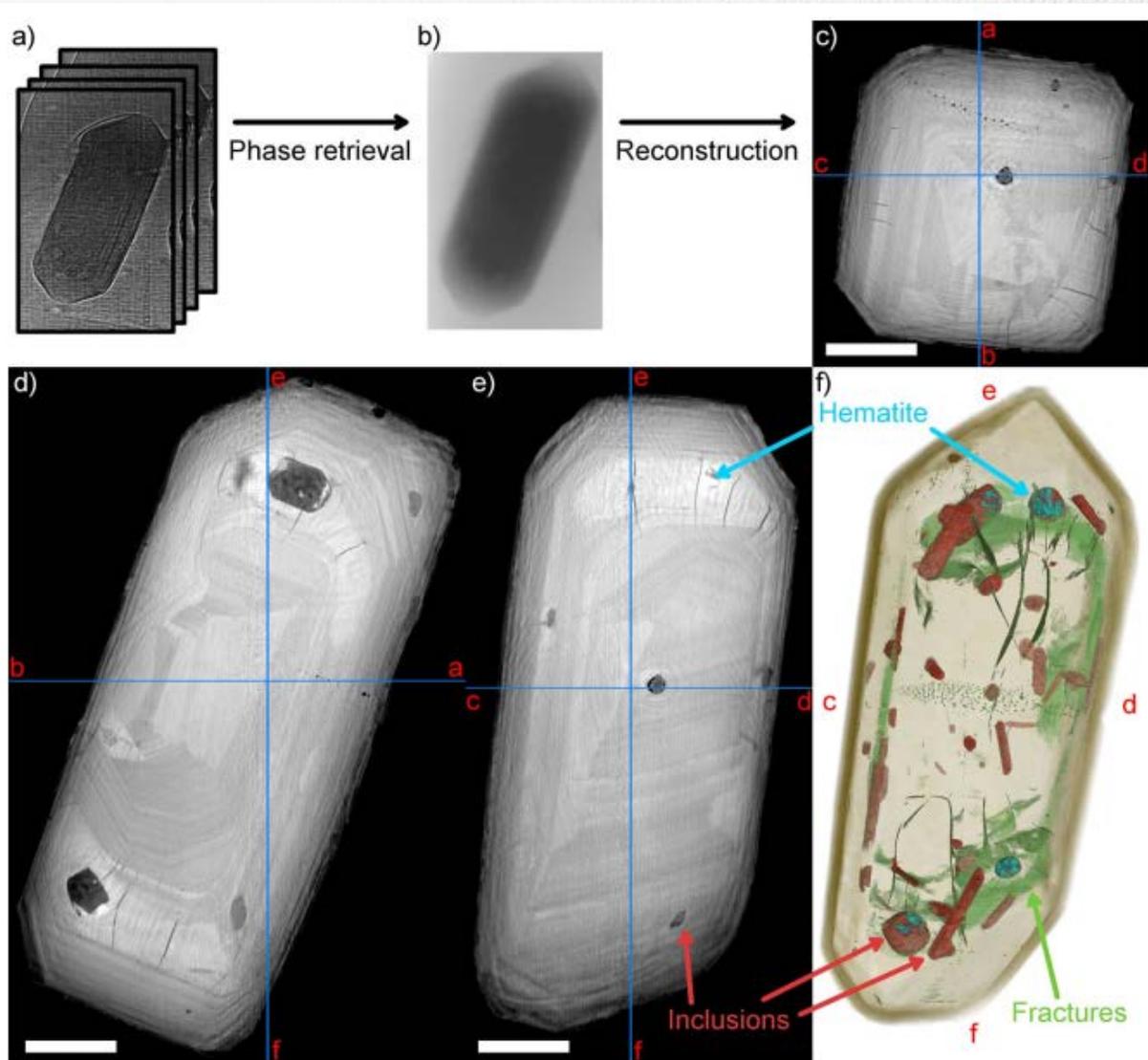
## Методы исследования

- Многоэлементный флуоресцентный анализ и картографирование с пространственным разрешением до 100 нм, совмещённые с рентгеновской дифракцией
- Флуоресцентная микротомография с усилением контраста благодаря выбору энергии вблизи краев поглощения

# Секция 1-1-1 «Микро- и нанофокус»

Анализ химического состава и кристаллической структуры образца с разрешением до 100нм

## Элементное картирование



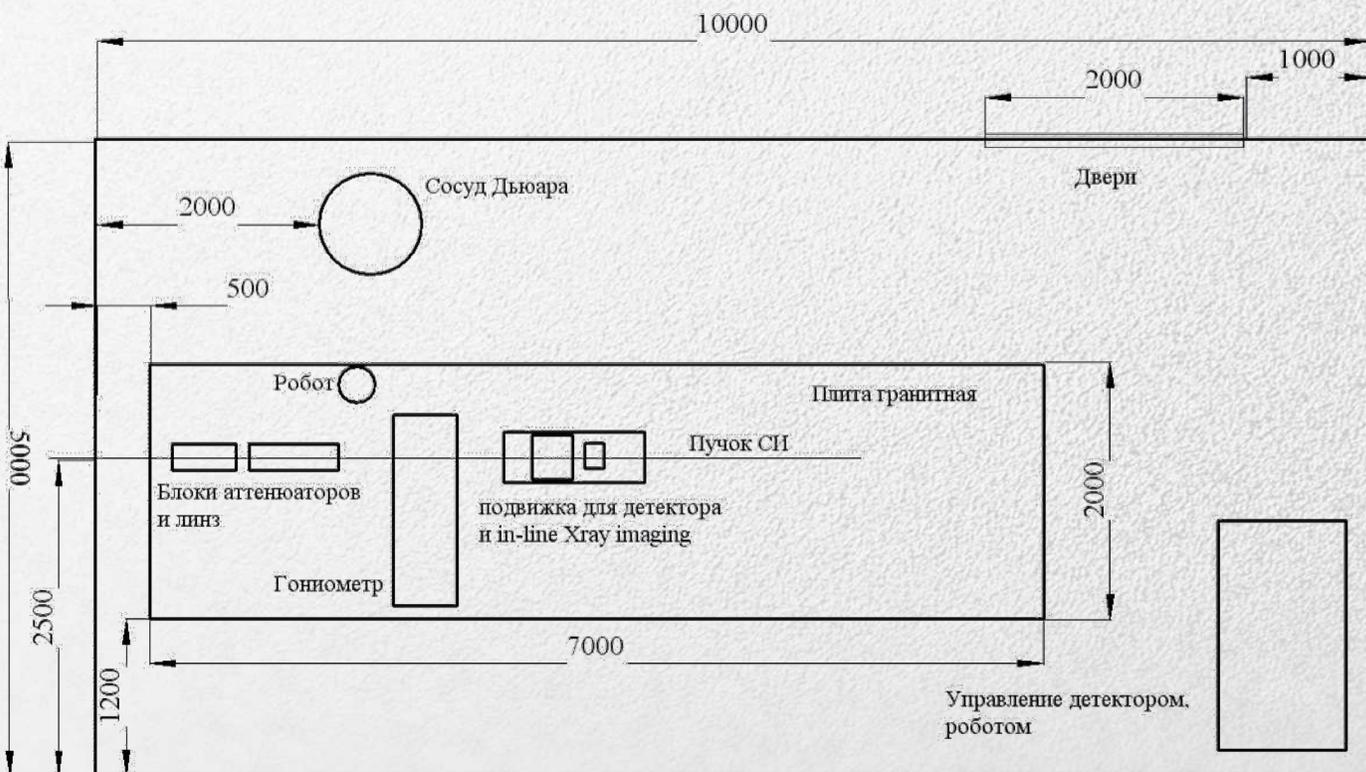
# Секция 1-1-2 «Макромолекулярная кристаллография» и лаб. корпус

## Рентгеноструктурный анализ монокристаллов биополимеров

Планируется решение таких задач как:

- получение данных о строении белков; комплексов белков с субстратами, ингибиторами, нуклеиновыми кислотами; белок-белковых комплексов
- сбор РСА данных методом серийной кристаллографии
- сбор данных на «электронную плотность» для малых органических молекул

### Экспериментальный хатч 1-1-2 (5×10 м)



### Методы исследования

- Рентгеноструктурный анализ в т.ч. при 100К, автоматизированная подача образцов
- серийная кристаллография с inline-визуализацией исследуемых объектов при температуре 100К
- одновременная реализация рентгеновской микроскопии и фазоконтрастной микротомографии

# Секция 1-1-2 «Макромолекулярная кристаллография» и лаб. корпус

## Рентгеноструктурный анализ монокристаллов биополимеров

### Основные этапы расшифровки структуры белка

- Получение ГМО конструкции, выделение белка, создание комплексов белков с ингибиторами, с нукл. кислотами и т. д.

• Подготовка к кристаллизации

**лабораторный корпус - 1 этаж**

• Кристаллизация

**лабораторный корпус - подвал**

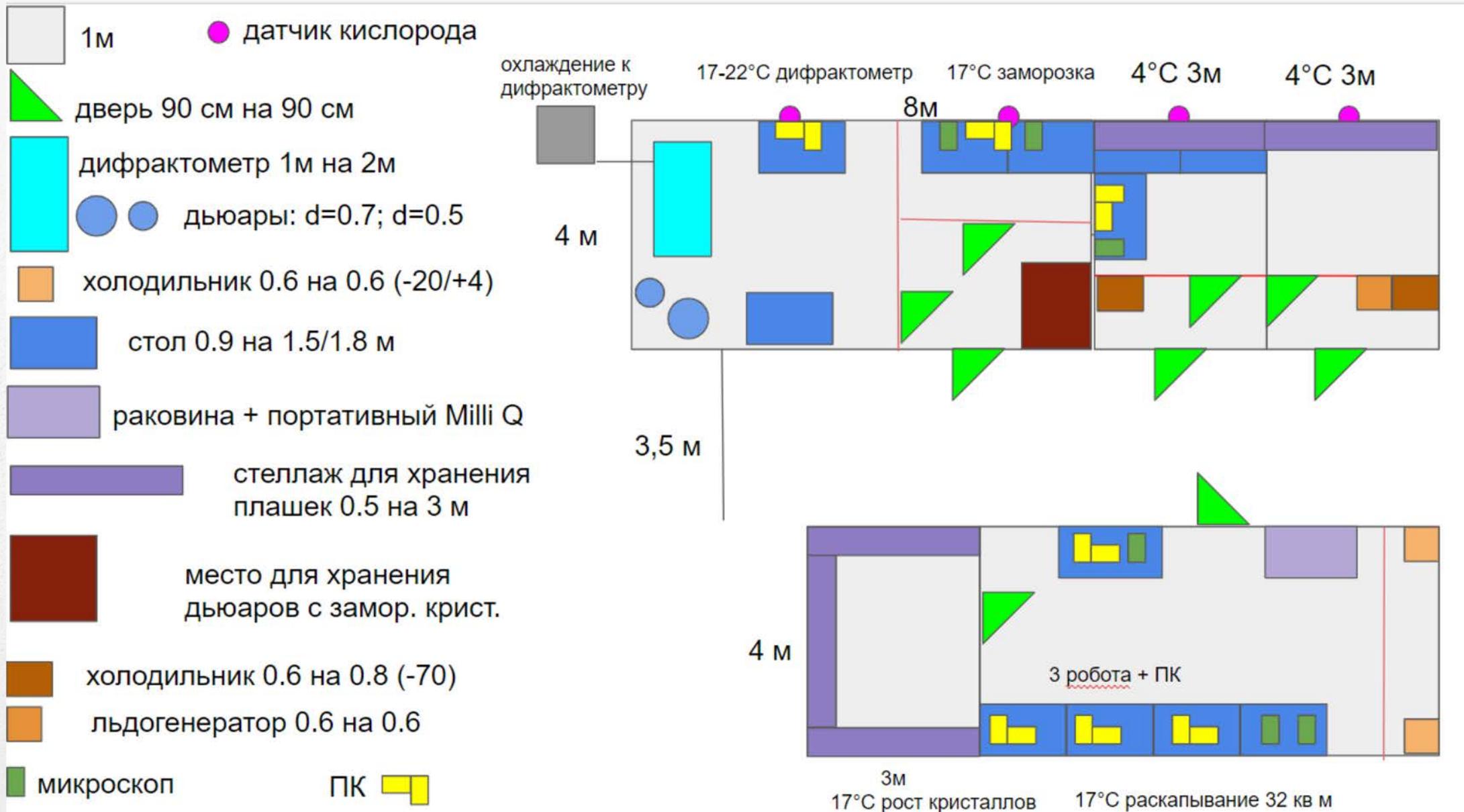
• Сбор данных РСА (одна длина волны)

**1-1-2**

• Решение и уточнение структуры

существенная потребность  
в кадрах

# План комнат в лабораторном корпусе для получения кристаллов макромолекул (подвал)



# Секция 1-1-2 «Макромолекулярная кристаллография» и лаб. корпус

## Рентгеноструктурный анализ монокристаллов биополимеров

### Основные этапы расшифровки структуры белка

- Получение ГМО конструкции, выделение белка, создание комплексов белков с ингибиторами, с нукл. кислотами и т. д.

• Подготовка к кристаллизации

**лабораторный корпус - 1 этаж**

• Кристаллизация

**лабораторный корпус - подвал**

• Сбор данных РСА (одна длина волны)

**1-1-2**

• Решение и уточнение структуры

существенная потребность  
в кадрах

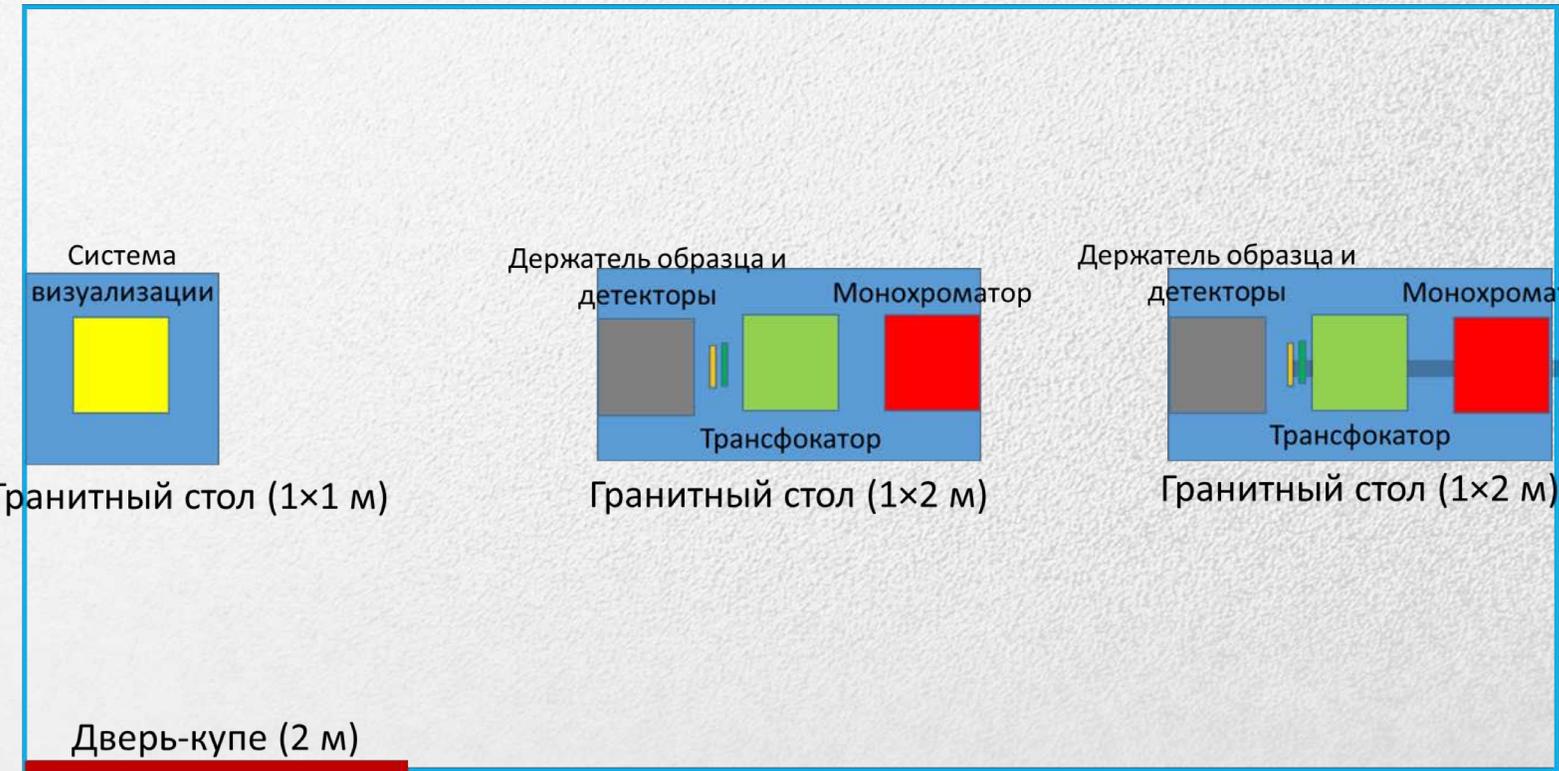
# Секция 1-1-3 «Гамма-резонанс»

## Синхротронно-стимулированная генерация мёссбауэровской линии

Планируется решение таких задач как:

- исследование магнитной структуры функциональных наноматериалов
- картирование степени окисления железа в геологических образцах (необходимо для задач оценки алмазного потенциала месторождений)

Экспериментальный хатч 1-1-3 (4×8 м)



### Методы исследования

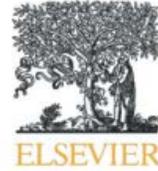
- Мёссбауэровская спектроскопия на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  (резонансная ядерная монохроматизация на кристалле  $^{57}\text{FeVO}_3$  14.4 кэВ)
- Ядерное рассеяние вперед (временная структура ядерной флуоресценции)
- Неупругое ядерное рассеяние

Окружение образца: криогенные и высокие температуры, ячейки высокого давления и магнитные поля

# Секция 1-1-3 «Гамма-резонанс»

## Синхротронно-стимулированная генерация мёссбауэровской линии

We collected SMS spectra at five different positions on a  $150 \times 150 \mu\text{m}^2$  ferropericlasite inclusion that showed low  $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}_{\text{tot}}$  overall ( $<0.02$ ) but the presence of a magnetic component whose abundance varied systematically across the inclusion.



Contents lists available at ScienceDirect

Lithos

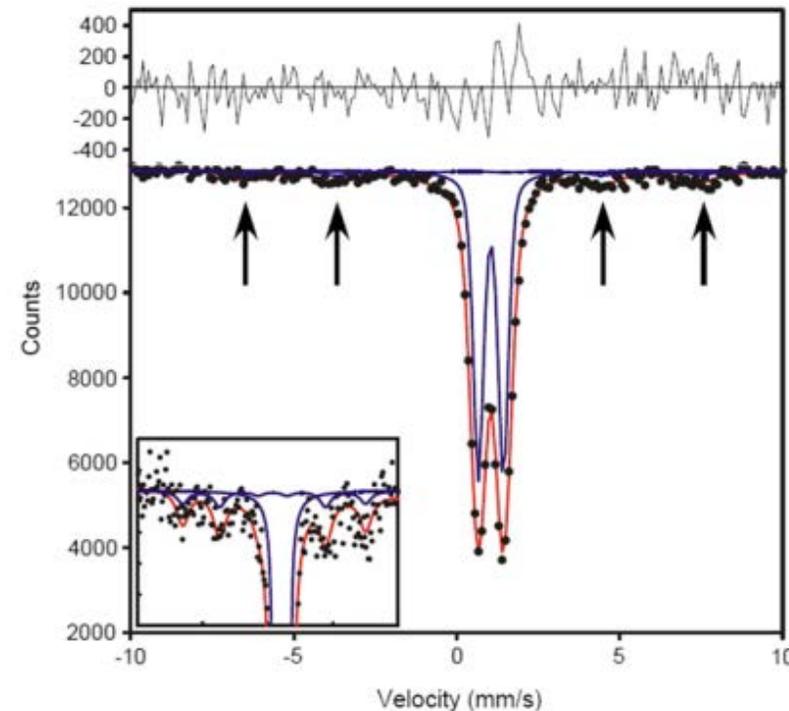
journal homepage: [www.elsevier.com/locate/lithos](http://www.elsevier.com/locate/lithos)



Synchrotron Mössbauer Source technique for *in situ* measurement of iron-bearing inclusions in natural diamonds



F. Nestola <sup>a,\*</sup>, V. Cerantola <sup>b</sup>, S. Milani <sup>a</sup>, C. Anzolini <sup>a</sup>, C. McCammon <sup>c</sup>, D. Novella <sup>d</sup>, I. Kuppenko <sup>e</sup>, A. Chumakov <sup>b</sup>, R. Rüffer <sup>b</sup>, J.W. Harris <sup>f</sup>



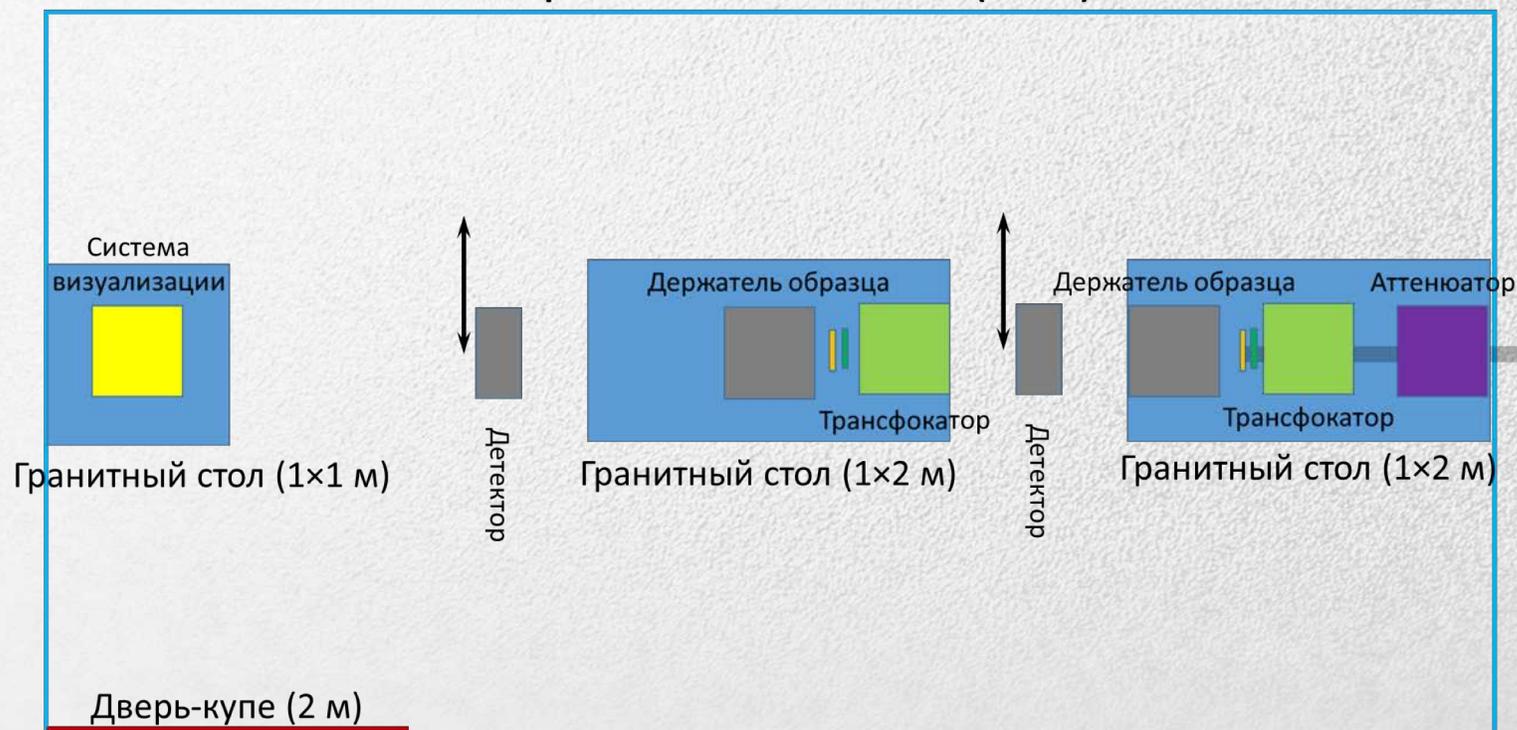
## Секция 1-1-4 «Экстремальные условия»

### Состояние и превращения материалов при одновременном воздействии $P$ (до 300 ГПа) и $T$ (100-6000 К), магнитных полей, лазерного излучения

Планируется решение таких задач как:

- Изучение структуры кристаллических, аморфных и жидких тел в экстремальных условиях для решения задач геологии
- Синтез новых соединений при действии экстремальных условий (гидридные материалы при 100 ГПа (высокотемпературные сверхпроводники, 2015 год))

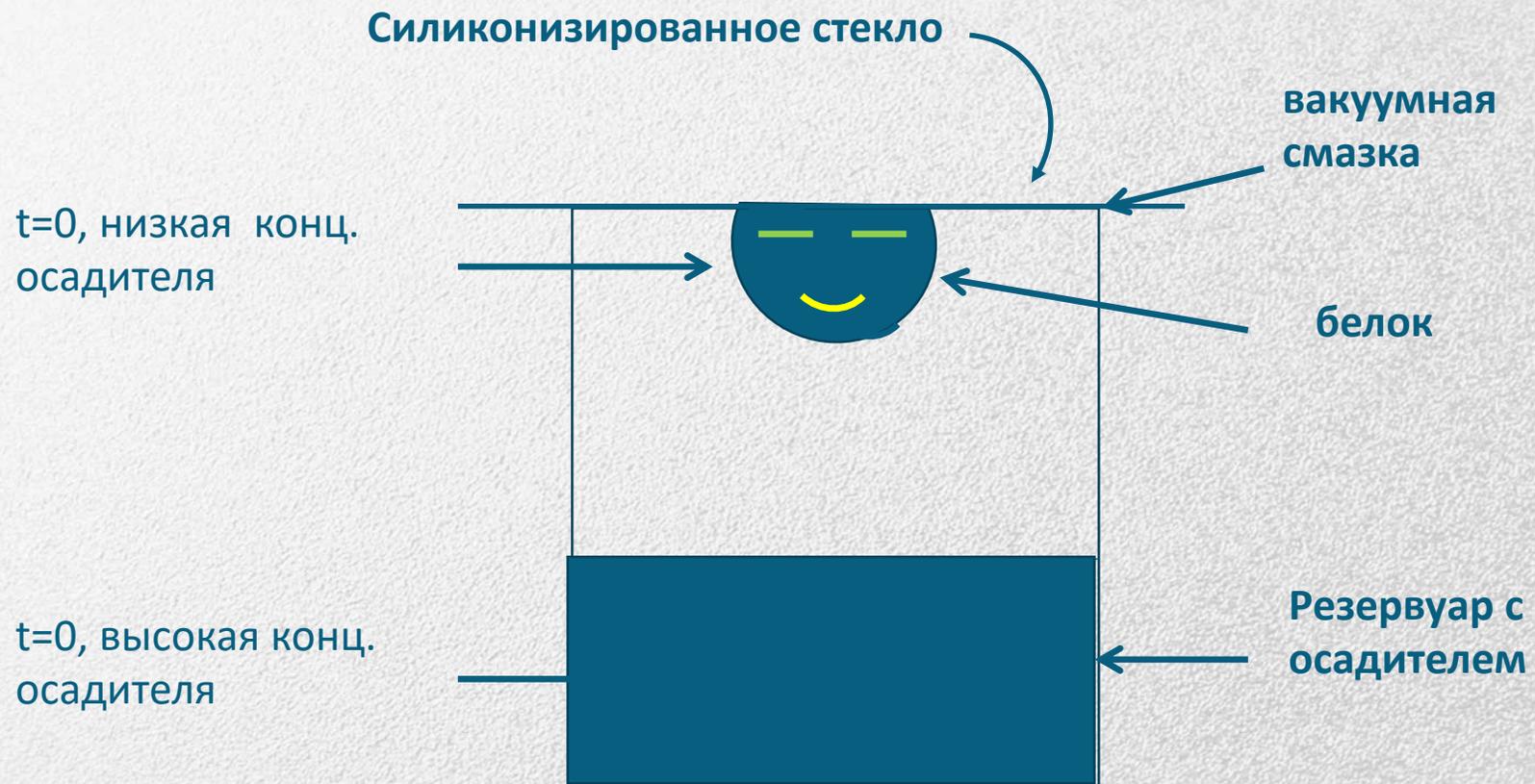
Экспериментальный хатч 1-1-4 (4×8 м)



### Методы исследования

- Монокристаллическая дифракция *in situ* до 1 млн атм / 6000 К
- Порошковая дифракция *in situ* до 3+ млн атм / 6000 К

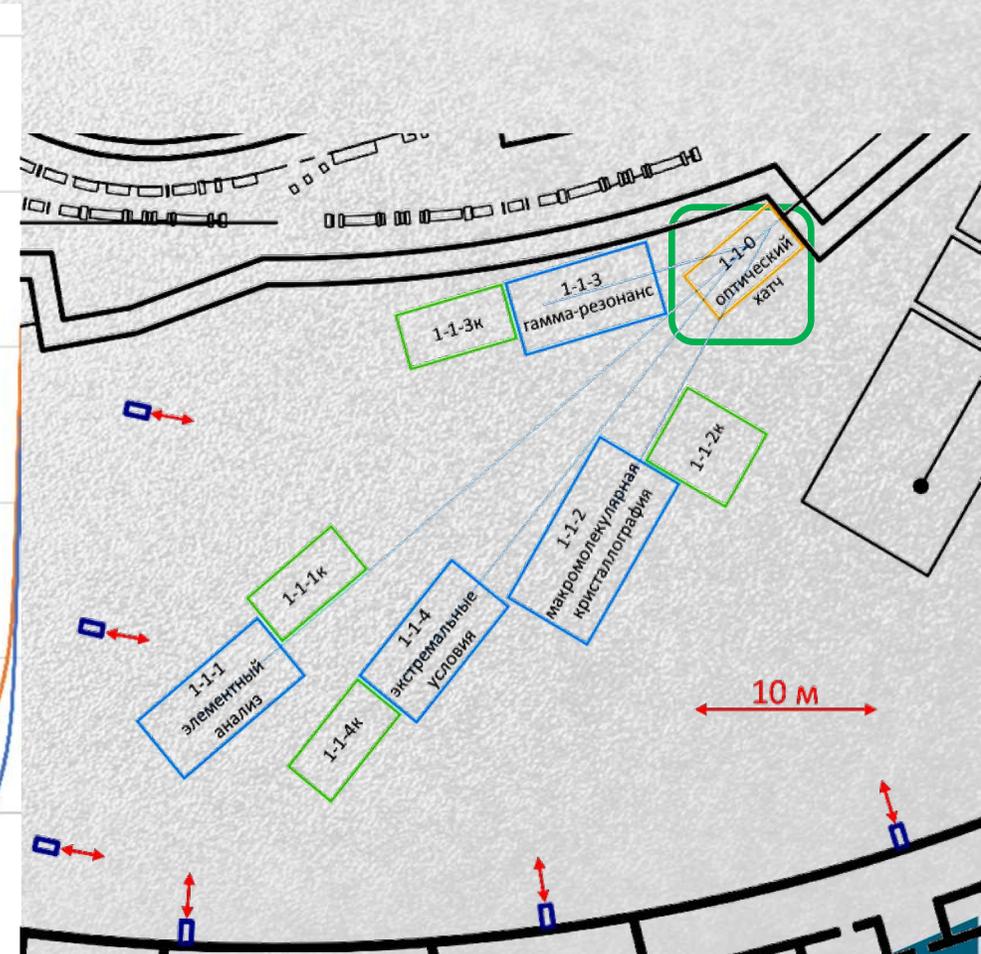
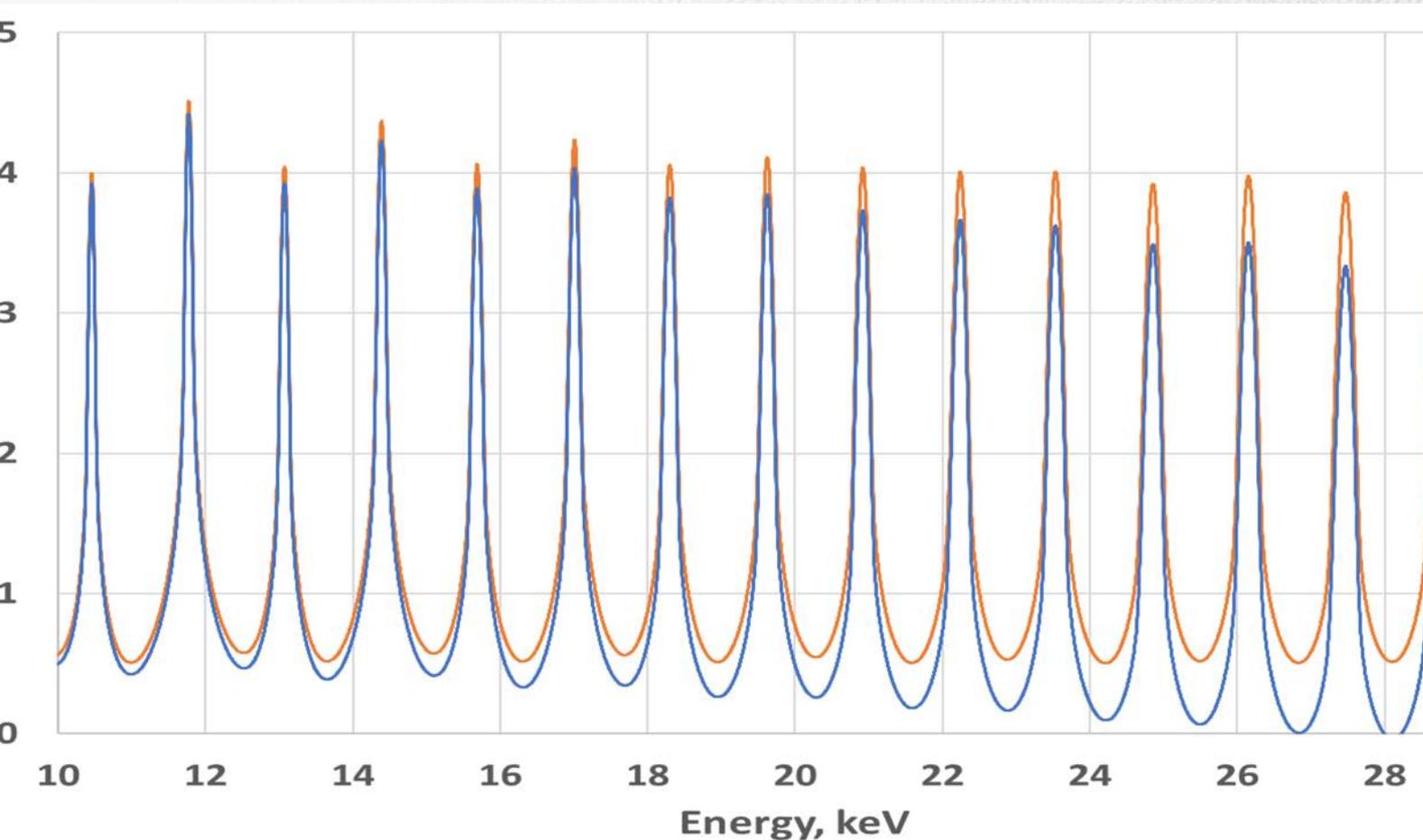
# Спасибо за внимание!



Спасибо за внимание!



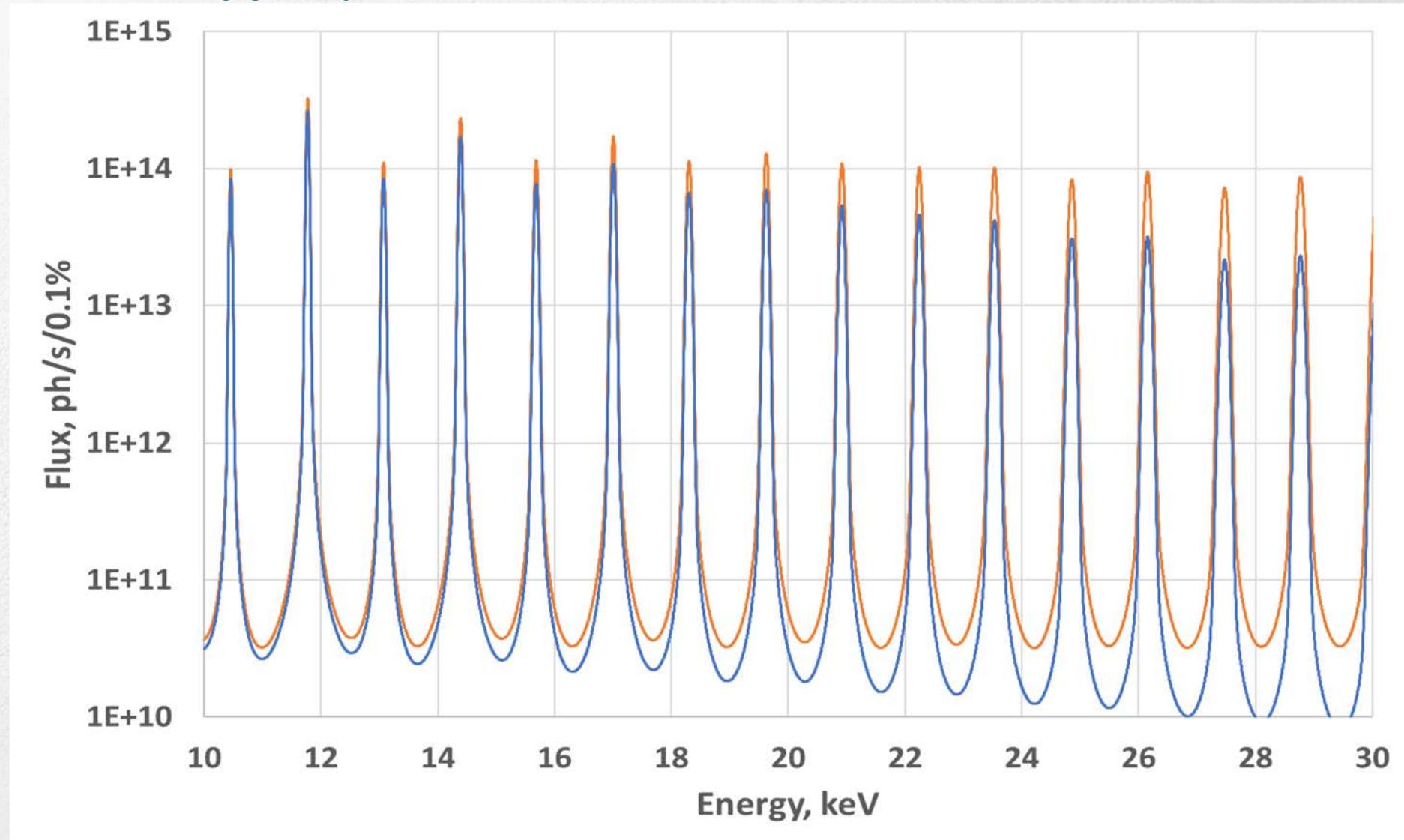
## Влияние фазовой ошибки $3^\circ$ на высшие гармоники



Расчёт в SRW для параметров:

$I = 0.4 \text{ A}$ ,  $\epsilon_x = 96 \text{ пм}\cdot\text{рад}$ ,  $\beta_x = 12 \text{ м}$ ,  $\beta_y = 2 \text{ м}$ ,  $\kappa = 10\%$ ,  $\Delta E/E = 0.0086$

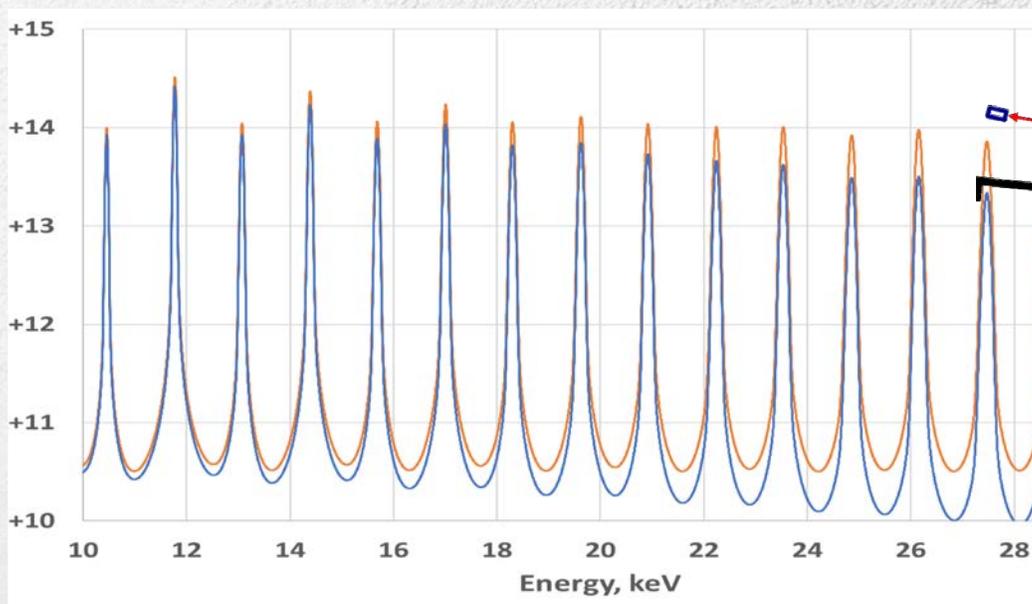
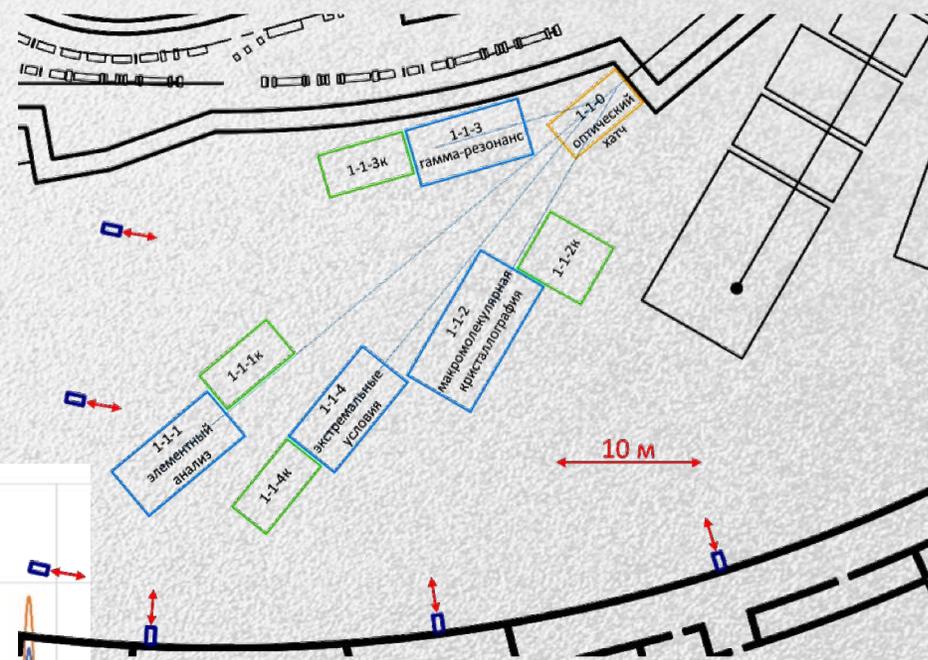
Поток через сечение (2FWHM) первой рабочей (XI) гармоники на расстоянии 15 м от источника



## Влияние фазовой ошибки $3^\circ$ на высшие гармоники

- Расчёт в SRW для параметров:
- $I = 0.4$  А,  $\varepsilon_x = 96$  пм·рад,  $\beta_x = 12$  м,  $\beta_y = 2$  м,  $\kappa = 10\%$ ,  $\Delta E/E = 0.0086$
- Поток через сечение (2FWHM) первой рабочей (XI) гармоники на расстоянии 15 м от источника

- Используется излучение сверхпроводящего ондулятора
- Однокристалльные алмазные монохроматоры-расщепители пучка (в Брэгговской геометрии) отводят ондуляторные гармоники по секциям
- Композитные рефракционные линзы из бериллия и алмаза (трансфокаторы) фокусируют пучок на образце до субмикронных размеров с сохранением когерентных свойств

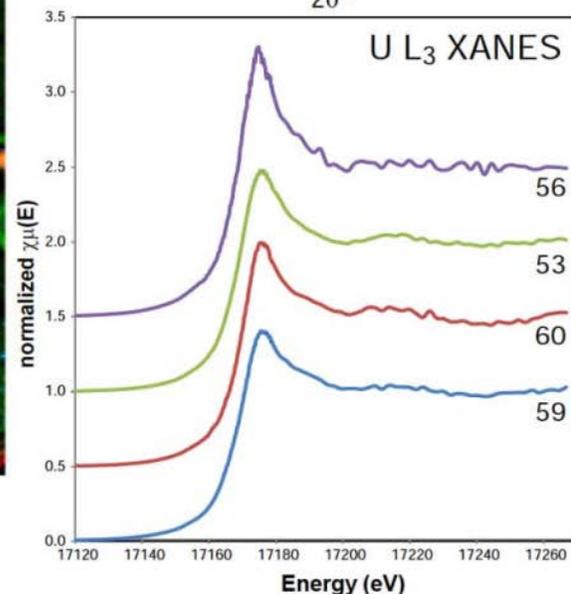
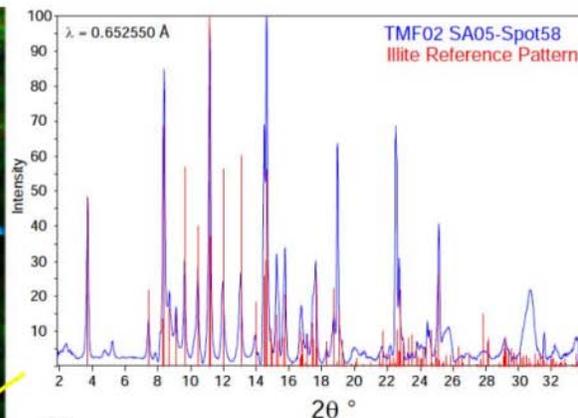
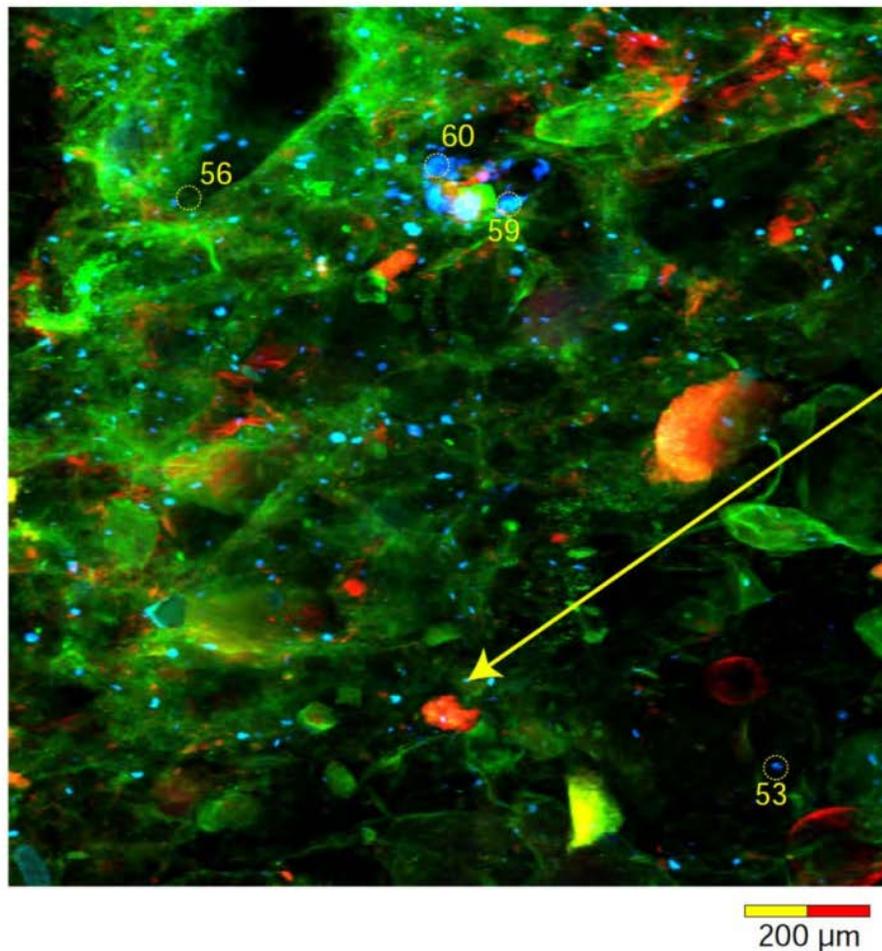


# Секция 1-1-1 «Микро- и нанофокус»

Анализ химического состава и кристаллической структуры образца с разрешением до 150 нм

## Элементное картирование

Fe K $\alpha$  - As K $\beta$  - U L $\alpha$



Комплексный анализ глинистых частиц из зоны радиоактивного загрязнения, полученные на источнике СИ APS (США). Слева – пространственное распределение Fe (красный), As (зелёный) и U (синий), справа – дифракционный профиль, демонстрирующий минералы-концентраты элементов (вверху) и спектры рентгеновского поглощения, показывающие валентное состояние урана (внизу) в конкретных точках образца (по Mihok et al. 2017).

# Источник СИ

- СП ондулятор «№2»
- Период 18 мм
- Длина 2.3 м
- Поле 1.36 Тл ( $K = 2.29$ )
- Фазовая ошибка  $3^\circ$
- Рабочие гармоники
  - XI (14.4 кэВ) – секция «Гамма-резонанс»
  - XIII (17.0 кэВ) – секция «Структурная биология»
  - XXI (27.5 кэВ) – секция «Экстремальное состояние»
  - Остальные – секция «Микро- и нанофокус»