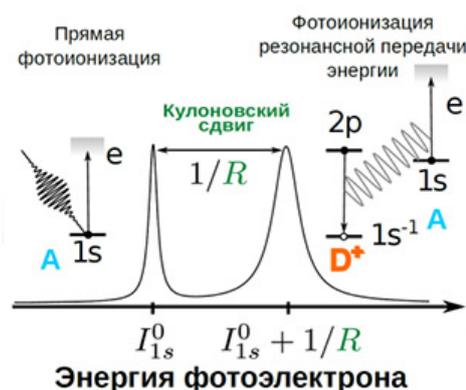


Учёные СФУ предложили определять структуру вещества при помощи рентгеновского излучения

Международный исследовательский коллектив с участием учёных Института нанотехнологий, спектроскопии и квантовой химии Сибирского федерального университета предложил новый метод определений структуры вещества с помощью рентгеновского излучения.



Новый метод потенциально может стать ещё одним мощным инструментом для выявления локальной структуры сложных молекулярных, в том числе биологических систем.

Результаты работы учёных [опубликованы](#) в высокоимпактном профессиональном физическом журнале *Journal of Chemical Physics Letters*.

Исследование выполнено по [гранту](#) РФФ.

В новом методе для определения локальной структуры вещества используется резонансный перенос энергии между двумя частицами, выступающими в роли донора и акцептора (атомы, молекулы, хромофоры в белках и т. д.), при их облучении рентгеновскими импульсами.

Суть явления заключается в следующем. Рентгеновский фотон ионизует основной 1s электрон тяжёлого атома-донора. Затем происходит локальный внутриатомный переход 2p→1s. Испущенный при этом спонтанный фотон резонансно поглощается атомом-акцептором и ионизует его 1s электрон. При этом ключевым моментом является сдвиг потенциала ионизации 1s электрона акцептора кулоновским полем ионизованного донорного атома. Этот сдвиг зависит от расстояния между донором и акцептором и позволяет определить расстояние между атомами R и тип атома-акцептора. Знание этой информации позволяет определить всю структуру исследуемого вещества.

В оптическом диапазоне по мере увеличения расстояния между донором акцептором скорость переноса энергии очень быстро падает на очень малых расстояниях порядка нескольких нанометров в режиме так называемого классического фёрстеровского переноса энергии. Такой резонансный перенос энергии является ключевым механизмом обмена энергией в ряде практически важных систем — от центров окраски в кристаллических материалах до фотосинтетических светособирающих комплексов и флуоресцентных белков. При переходе в рентгеновский диапазон ситуация меняется кардинальным образом: в жёстком рентгеновском диапазоне, в котором работают учёные, фёрстеровский механизм переноса энергии неприменим, и начинают работать эффекты переноса энергии в «дальней зоне», то есть перенос энергии может осуществляться на расстояния существенно большем, чем в классическом фёрстеровском режиме. Коллективом учёных была разработана новая теоретическая модель переноса энергии в дальней зоне для описания зависимости химических сдвигов переходов, наблюдаемых в рентгеновской эмиссии в зависимости от положения донорных и акцепторных атомов. В рамках этой модели перенос энергии происходит за счёт обмена фотонами. Такой «рентгеновский перенос энергии», предоставляет инструментарий для определения локальной структуры разнообразных веществ, в том числе биомолекул, содержащих тяжёлые атомы-доноры, такие как железо или сера. Предложенный метод позволяет определить структуру сложных молекул напрямую из эксперимента и таким образом может найти важные практические применения.

При этом результаты теоретических исследований, дополненные и усиленные первым экспериментальным наблюдением переноса энергии в дальней зоне, выполненным группой учёных на синхротроне Солей (Франция), имеют ещё одну возможность для развития. Важной особенностью предложенного метода является то, что сравнительно слабый сигнал рентгеновской фотоэмиссии, вызванный резонансным переносом энергии, при использовании синхротронного излучения может быть значительно усилен в режиме интенсивных и коротких рентгеновских импульсов лазера на свободных электронах. Этот источник даёт уникальную принципиальную возможность не просто описать «застывшую» структуру вещества, но и отслеживать структурную динамику в реальном временном масштабе, что в настоящее время практически недоступно с использованием других методов для анализа структуры вещества.

Об исследовании учёных СФУ [рассказали](#) также журналисты «МИА Россия сегодня».

[Пресс-служба СФУ](#), 26 октября 2017 г.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Адрес страницы: <https://news.sfu-kras.ru/node/19503>