

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
"КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ"

КУРЧАТОВСКИЙ КОМПЛЕКС
СИНХРОТРОННО-НЕЙТРОННЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ГОДОВОЙ ОТЧЁТ

за 2019 год

www.kcsni.nrcki.ru

Москва

2020

Оглавление

Введение	5
I Общие сведения о работе ККСНИ по заявкам. Уникальные научные установки КИСИ и НИК ИР-8	7
1 Общие сведения о текущей работе комплекса	8
1.1. Работа источника синхротронного излучения (КИСИ) в 2019 году	8
1.2. Работа исследовательского реактора	9
1.3. Работа УНУ КИСИ по заявкам пользователей в 2019 году	10
1.4. Работа УНУ НИК ИР-8 по заявкам пользователей в 2019 году	14
2 Развитие экспериментальной базы	16
2.1. Развитие экспериментальной базы КИСИ	16
2.2. Развитие экспериментальной базы ИР-8	19
II Научная деятельность комплекса	21
3 Избранные научные результаты	22
4 Разработка концепции синхротрона 4-го поколения с энергией 6 гэВ	51
4.1. Ожидаемые параметры синхротрона СИЛА	52
4.2. Концепт-проекты экспериментальных станций первой очереди синхротрона СИЛА	57
III Научно-организационная деятельность. Публикации	81
5 Научно-организационная деятельность	82
6 Список публикаций сотрудников комплекса	87
IV Приложения. Справочные материалы	94

Введение

Концентрация наиболее успешных фундаментальных научных исследований во всем мире происходит в крупных научных центрах, сформированных вокруг уникальных научных установок класса «мегасайенс». Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований (ККСНИ) – единственное в России и одно из немногих мест в мире, где на одной площадке сосредоточены несколько таких установок: специализированный источник синхротронного излучения и исследовательский нейтронный реактор ИР-8 а также набор современных лабораторных рентгеновских приборов.



Первого октября 2019 г. Курчатовский источник синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» отметил своё двадцатилетие. Официальная инаугурация установки состоялась в 1999 году в присутствии председателя Правительства Российской Федерации В. В. Путина.

На сегодняшний день на «КИСИ-Курчатов» работает 16 экспериментальных исследовательских станций разной направленности. Идёт модернизация существующих экспериментальных линий и вводятся в эксплуатацию новые станции. За 2019 год было выполнено 173 заявки, поступивших от подразделений НИЦ «Курчатовский институт» и более чем 40 организаций-пользователей, опубликовано 117 статей в рецензируемых журналах.

В рамках государственного контракта министерства науки и высшего образования были выполнены работы по развитию исследовательской инфраструктуры «КИСИ-Курчатов». Также «КИСИ-Курчатов» участвовал в конкурсе Российского научного фонда по мероприятию «Проведение исследований на базе существующей научной инфраструктуры мирового уровня». На конкурс различными организациями было подано 22 заявки, в которых планировалось проводить эксперименты на Курчатовском источнике СИ. Фонд поддерживал десять заявок. Это наибольшее число проектов, поддержанных для одного объекта инфраструктуры.

На одной площадке с источником синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» располагается нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8. Это делает Курчатовский комплекс уникальным по своим возможностям научным центром. В настоящее время исследовательский реактор ИР-8 является единственной работающей российской установкой, предназначенной для проведения экспериментальных исследований с применением рассеяния нейтронов в различных областях науки и техники. Нейтронный

исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8 оснащён шестью экспериментальными станциями, которые используются для проведения фундаментальных и прикладных исследований в области физики конденсированного состояния, физики наносистем и материаловедения. Исследовательский реактор ИР-8 работает в режиме центра коллективного использования и принимает заявки на проведение экспериментов от российских и зарубежных исследователей.

Важным направлением деятельности ККСНИ в 2019 г. стало участие в разработке Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры, утверждённой Постановлением Правительства РФ № 287 от 16 марта 2020 г. На базе НИЦ «Курчатовский институт» в рамках программы планируется создание новейшего отечественного научно-образовательного центра ядерной медицины. Он будет включать в себя модернизированные комплексы ионной (углеродной), протонной лучевой терапии, онкоофтальмологический комплекс и радиоизотопный комплекс наработки широкого спектра медицинских радионуклидов для создания радиофармпрепаратов.

Также Курчатовским институтом будет выполнена глубокая модернизация синхротрона «КИСИ-Курчатов», спроектирован и построен уникальный синхротронно-лазерный комплекс СИЛА. Для этого проекта в 2019 г. были разработаны концепции экспериментальных станций первой очереди и определены их целевые параметры. Выполнен предварительный подбор устройств-излучателей, сделаны оценки достижимой яркости и потоков фотонов.



Коллектив Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований.
01 октября 2019 г.

В год юбилея «КИСИ-Курчатов» коллектив ККСНИ полон новых научных идей. Комплекс ставит и решает масштабные задачи, нацеленные на перспективу, и ведущие к укреплению нашей страны.

Часть I

Общие сведения о работе
ККСНИ по заявкам.

Уникальные научные установки КИСИ
и НИК ИР-8

Глава 1

Общие сведения о текущей работе комплекса

1.1. Работа источника синхротронного излучения (КИСИ) в 2019 году

Таблица 1.1. Статистические данные о работе ускорителя

Полное время работы на пользователей (согласно календарному плану работы УНК)	2896 ч
Чистое запланированное время работы на пользователей (без учёта времени на настройку и перенакопление ~ 15%)	2462 ч
Фактическое время работы на эксперимент (в машине имеется пучок при E=2.5 ГэВ)	2406 ч
Доля от запланированного	97.7%
Суммарная наработка всех каналов вывода СИ (фиксируется по факту открытия приёмников СИ)	17483 ч
Среднее количество работающих каналов вывода СИ	7.3

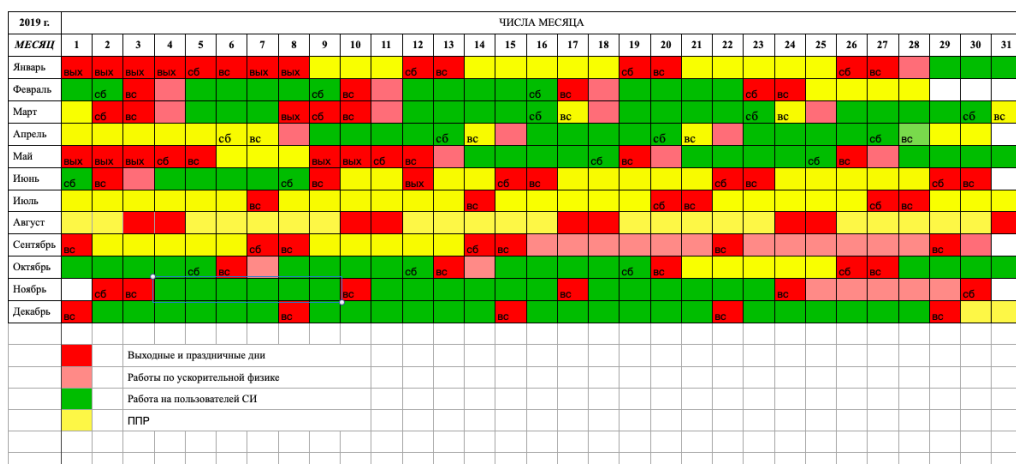


Рис. 1.1. График работы синхротрона «КИСИ-Курчатов» в 2019 г.

1.2. Работа исследовательского реактора ИР-8 в 2019 г

Таблица 1.2. Статистические данные о работе реактора ИР-8.

Полное время работы реактора ИР-8	2219 ч
Запланированное время работы на эксперименты	1775 ч
Фактическое время работы на эксперимент	1713 ч
Доля от запланированного	96.5%
Суммарная наработка всех горизонтальных каналов ИР-8 по заявкам	2643 ч
Количество работающих на пользователей горизонтальных каналов	4

2019 г.	ЧИСЛА месяца																														
МЕСЯЦ	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
Январь	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	В	В	-	-	-	-	-	-	сб	вс	-	-	-	-	-	сб	вс	-	-	-	-
Февраль	-	сб	вс	х	х	х	х	х	сб	вс	-	-	х	х	х	х	сб	вс	-	-	-	х	х	х	х	х	х	х	-	-	-
Март	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	сб	вс	-	-	-	-	-	-	-	-
Апрель	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	сб	вс	-	-	-	-	-	сб	вс	х	х	-
Май	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	сб	вс	-	-	-	-	-	сб	вс	х	х	х	х	х
Июнь	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	х	сб	вс	-	-	-	-	-	сб	вс	х	х	х	х	х	х	сб	вс
Июль																															
Август																															
Сентябрь	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП
Октябрь	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП
Ноябрь		сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб
Декабрь	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	ПНП	сб	вс	ПНП	ПНП
		Праздничные дни																													
	-	ПНП																													
	х	Работа на мощности																													
		Отпуск																													
		Работа без мощности. В режиме 7,2/5 + смены по взаимодействию со строителями.																													
	В	Выходные дни																													

Рис. 1.2. График работы реактора ИР-8 в 2019 г.

1.3. Работа УНУ КИСИ по заявкам пользователей в 2019 году

Уникальная научная установка «Курчатовский источник синхротронного излучения» (УНУ КИСИ) в 2019 году активно работала по заявкам сторонних организаций. За отчётный период были реализованы эксперименты по 173 заявкам от 42 организаций-пользователей. География поступивших заявок довольно традиционна для УНУ КИСИ. Значительная часть организаций-пользователей сосредоточена в Москве, поэтому большинство заявок (136) поступило от 23 московских организаций. Распределение заявок по городам представлено на рисунке 1.3. Также выделяются по количеству поступивших заявок организации Новосибирска (7 заявок), Санкт-Петербурга (4 заявки) и Ростова-на-Дону (3 заявки).

По ведомственной принадлежности 19 организаций являются институтами РАН, 18 — высшими учебными заведениями, 1 — научная организация другой ведомственной принадлежности и 1 — коммерческой организацией. Тем не менее по количеству поданных заявок и пучковому времени, затраченному на проведение исследований, приблизительно четверть тратится на внутренние проекты НИЦ «Курчатовский институт» (рис. 1.4). То есть УНУ КИСИ используется в значительной мере как внутренняя «лабораторная» установка. Из оставшегося пучкового времени половина времени была затрачена на решение задач институтов РАН, и четверть на проведение измерений по заявкам высших учебных заведений.

Общий список организаций-пользователей приведен в Таблице 1.3. По количеству заявок на проведение измерений и количеству затраченного пучкового време-

ни лидирует НИЦ «Курчатовский институт» с 49 заявками и 1585 часами затраченного пучкового времени. Следующими организациями по количеству часов являются Московский государственный университет (800 часов), Палеонтологический институт РАН (730 часов), Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН (650 часов) и Казанский федеральный университет (350 часов). По количеству заявок выделяются организации-пользователи: Московский государственный университет (18 заявок), Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН (15 заявок) и Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН (11 заявок). Наибольшее количество пучкового времени (360 часов) было затрачено на проведение измерений по заявке №625 «Отработка метода обратной дифракции для изучения пьезоэлектрических свойств кристаллов» от НИЦ «Курчатовский Институт».

Всего за 2019 год на 14 станциях УНУ КИСИ на проведение измерений по заявкам затрачено 9428 часов. Наиболее задействованными по пучковому времени были станции «Структурное материаловедение» (1770 часа), «Белок» (1680 часа) и «ЭСХА» (1089 часа), в сумме давая 48% от всего времени, затрачиваемого на работу по заявкам. По количеству выполненных заявок наиболее затребованными были станции «Белок» (44 заявки), «Структурное материаловедение» (40 заявок) и «БиоМУР» (27 заявок). Безусловно, не все заявки требуют одинакового пучкового времени для выполнения, и различные методы имеют разную сложность в реализации.



Рис. 1.3. География заявок пользователей. Диаметр кружка соответствует количеству поступивших заявок

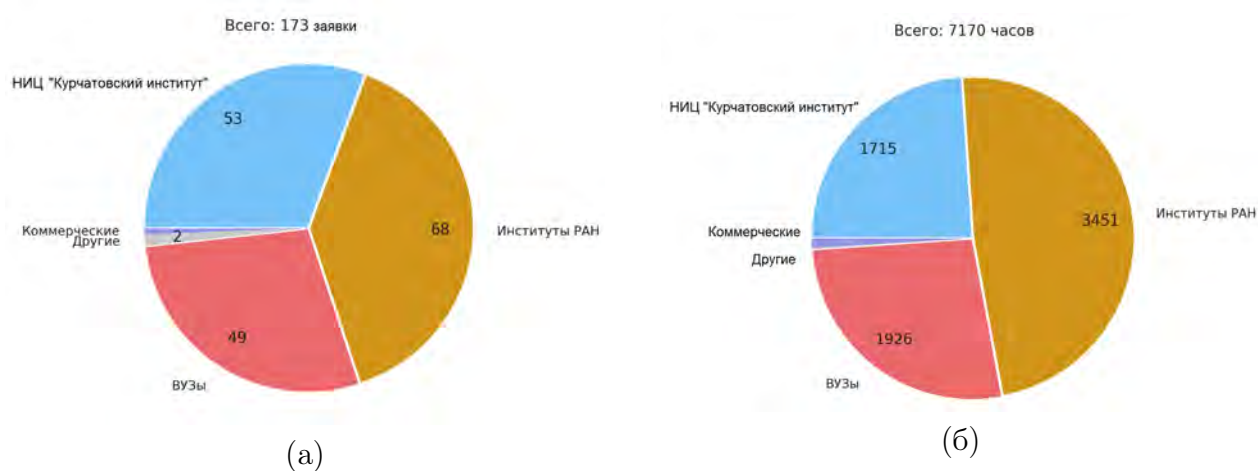


Рис. 1.4. Выполненные заявки по ведомственной принадлежности. а) количество выполненных заявок б) время(часы), затраченное на исполнение заявок

Таблица 1.3. Организации-пользователи синхротронного источника. Список отсортирован по убыванию использованных часов пучкового времени

№	Название организации	Затрачено часов	Выполнено заявок
1.	Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»	1585.0	49
2.	Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова	806.6	18
3.	Палеонтологический институт им. А. А. Борисяка РАН	730.7	8
4.	ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН	649.1	15
5.	Казанский федеральный университет	355.3	2
6.	Институт общей и неорганической химии РАН	333.6	6
7.	Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН	323.2	6
8.	Институт катализа СО РАН	320.8	3
9.	Воронежский государственный университет	319.5	2
10.	Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН	286.0	1
11.	Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН	278.7	2
12.	Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН	199.7	11
13.	Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН	199.5	2
14.	Санкт-Петербургский государственный университет	169.0	1
15.	Южный федеральный университет	150.1	3
16.	Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН	132.0	4
17.	МИРЭА — Российский Технологический Университет	131.3	6
18.	Институт физики микроструктур РАН	115.5	2
19.	Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова	108.3	2
20.	Российский университет дружбы народов	107.7	3
21.	ИРЕА НИЦ «Курчатовский институт»	103.0	2
22.	Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН	92.2	1
23.	Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»	90.7	4
24.	Институт физики металлов УрО РАН	76.0	1
25.	ООО «Армолед»	67.0	1
26.	НТО «Лазерные технологии»	59.0	1
27.	Сибирский федеральный университет	43.7	1
28.	Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН	39.0	1
29.	Балтийский федеральный университет им. И.Канта	38.0	1
30.	Институт проблем химической физики РАН	37.2	2

Таблица 1.3. Организации-пользователи синхротронного источника. Список отсортирован по убыванию использованных часов пучкового времени

№	Название организации	Затрачено часов	Выполнено заявок
31.	Институт металлургии УрО РАН	36.0	1
32.	Санкт-Петербургский Национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики (ИТМО)	35.0	1
33.	Национальный исследовательский Томский политехнический университет	34.0	1
34.	Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»	31.0	1
35.	Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт»	27.0	2
36.	Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН	24.9	1
37.	Факультет наук о материалах МГУ им. М. В. Ломоносова	21.2	1
38.	Московский физико-технический институт	20.0	1
39.	Институт физики СО РАН	16.0	1
40.	Центральный научно-исследовательский институт чёрной металлургии им. И. П. Бардина	11.6	2
41.	Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН	7.0	1
42.	Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М. И. Платова	4.3	1
43.	Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана	4.0	1
44.	Институт археологии РАН	3.6	1
45.	Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН	2.0	1

1.4. Работа УНУ НИК ИР-8 по заявкам пользователей в 2019 году

На уникальной научной установке «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» (УНУ НИК ИР-8) в 2019 году успешно продолжено внедрение системы заявок пользователей. Заявки принимаются на 4 станции (СТРЕСС, ДИСК, ДРАКОН, СТОИК), две оставшиеся станции, входящие в состав нейтронного комплекса, находятся в стадии модернизации (МОНДАТОС). За отчётный период были реализованы эксперименты по заявкам от 7 организаций-пользователей (см. Таблицу 1.4).

Основные организации-пользователи территориально располагаются в Москве и Московской области, Санкт-Петербурге и Екатеринбурге, что в первую очередь связано с близостью и доступностью нейтронных источников в этих регионах и, как следствие, образованием крупнейших российских центров по исследованию конденсированного вещества с помощью нейтронного излучения. Это реактор ИР-8 (НИЦ «Курчатовский Институт», г. Москва), реактор ИВВ-2М (Институт реакторных материалов, ИФМ УрО РАН, г. Заречный Свердловской области), реактор ВВР-М (НИЦ «Курчатовский Институт»-ПИЯФ, г. Гатчина Ленинградской области).

В 2019 году на УНУ НИК ИР-8 46% эффективного времени работы реактора было предоставлено для работы на внешних поль-

зователей, в остальное время проводились работы по выполнению внутренних НИР и грантов.

Можно отметить следующие основные фундаментальные и прикладные задачи, решение которых требует использования нейтронных пучков и практически реализуется на УНУ НИК ИР-8:

- исследование кристаллической и магнитной структуры твердых тел;
- исследование ядерной и магнитной структуры аморфных материалов;
- исследование вещества в экстремальных условиях;
- исследование динамики твёрдых тел;
- исследование структуры и функционирования биологических систем;
- исследование текстуры геологических объектов;
- исследование микроструктуры материалов;
- исследование напряжённо-деформированного состояния материалов;
- визуализация внутреннего строения объектов методами нейтронной томографии.

Таблица 1.4. Организации-пользователи нейтронного источника. Список отсортирован по убыванию использованных часов пучкового времени

№	Название организации	Затрачено часов	Выполнено заявок
1.	Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»	1411	7
2.	Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН	612	3
3.	Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»	208	2
4.	Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов	144	1
5.	Институт лазерных и сварочных технологий	120	1
6.	МИРЭА — Российский технологический университет	120	1
7.	Санкт-петербургский государственный университет, Институт наук о земле	20	1
8.	Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, химический факультет	20	1

Глава 2

Развитие экспериментальной базы

2.1. Развитие экспериментальной базы КИСИ

Разработана методика сшивки дифрактограмм

На станции РСА «КИСИ-Курчатов» реализован алгоритм получения порошковых дифракционных картин в высоком разрешении с использованием сканирующего двумерного детектора. Создано программ-

ное обеспечение, позволяющее проводить сшивку дифрактограмм, снятых при различных углах поворота детектора для максимизации угловой шкалы. Разработанная методика позволяет уменьшить инструментальный вклад в уширение пиков до 0.039° . Зарегистрировано 3 результата интеллектуальной деятельности.

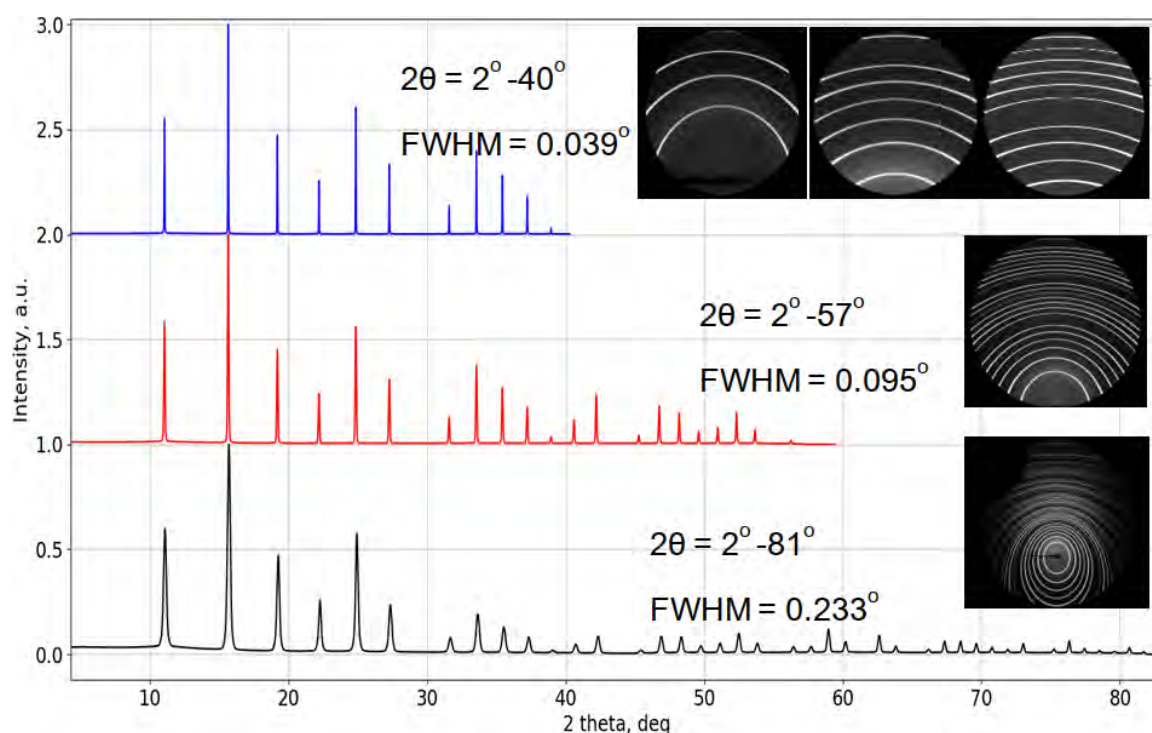


Рис. 2.1. Демонстрация работы алгоритма сшивки на примере дифрактограммы стандарта LaB_6 . Также приведены дифрактограммы стандарта при других параметрах установки

Дифракция СИ на углах, близких к обратным, от пьезокристалла $La_3Ga_5SiO_{14}$

Улучшение пьезоэлектрических характеристик кристаллов и создание кристаллов нового типа требуют глубоких знаний о структуре изучаемого объекта. Эта структура характеризует физико-механические эффекты, вызываемые влиянием температурных, механических, электромагнитных воздействий на исследуемые объекты.

Как правило, внешние воздействия вы-

зывают слабые смещения атомов из регулярного положения в кристаллической решётке, поэтому для анализа таких смещений требуются все более точные рентгеновские инструменты.

Особое место здесь занимает рентгеноструктурный анализ в геометрии рассеяния на углы дифракции, близкие к 180° . Эта методика характеризуется высокой чувствительностью к изменению положения дифракционного пика, вызываемого, например, для пьезоэлектриков приложением внешнего электрического поля.

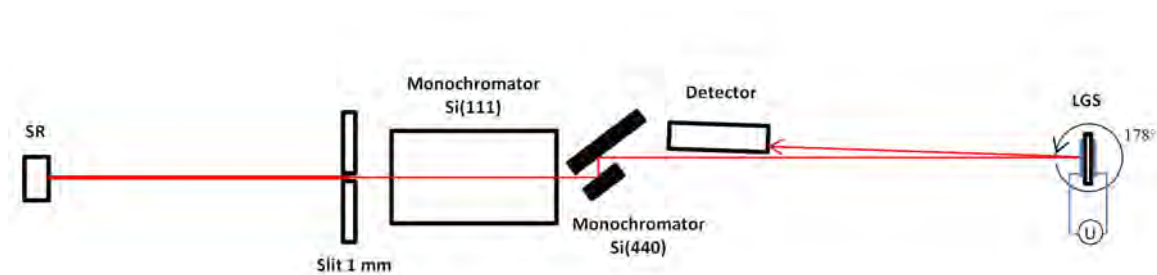


Рис. 2.2. Рентгенооптическая схема синхротронного спектрометра для измерения пьезомодуля методом дифракции на углы, близкие к обратным.

На станции EXAFS-D «КИСИ-Курчатов» схема дифракции доработана включением второго кристалла-монокристалла Si(220), что позволило приблизиться к углам дифракции, близким 180° (рис. 2.2). Также была разработана программа управления подачи внешнего электрического поля отрицательной и положительной полярностей. Программа позволила автоматизировать процесс измерения и обработки кривых дифракционного отражения от пьезокристаллов.

Цикл измерений пьезокристалла $La_3Ga_5SiO_{14}$ (770) отражения на угле дифракции 179° с полем положительной и отрицательной полярностей проведён 11 раз. Среднее значение сдвига дифракци-

онной кривой при приложении напряжения в $+997.7V$ составило 118.5 ± 1.4 угл.с. Сдвиг при напряжении $-999.3 V$ составил 121.2 ± 1.4 угл.с. Данному сдвигу соответствует изменение межплоскостного расстояния $\Delta d/d = 1.04 \times 10^{-5}$. Оценка пьезоэлектрического модуля для приложенных напряжений дает $|d_{11}| = 6.32 \times 10^{-12}$ S/N. Абсолютная ошибка составила 0.08×10^{-12} S/N.

Полученные значения модуля хорошо согласуются с ранее опубликованными данными. Погрешность методики не превышает 1%, что в разы лучше опубликованных ранее работ по определению коэффициентов пьезомодуля.

Развитие рентгеноакустического метода времяразрешающей рентгеновской дифракции на основе элементов адаптивной изгибной рентгеновской оптики

На станции РКФМ «КИСИ-Курчатов» проведены работы по развитию времяразрешающего метода измерения кривых дифракционного отражения (КДО) с использованием изгибного пьезоактуатора на основе монокристаллического бимомерного кристалла $LiNbO_3$. Для оценки временного разрешения, достижимого за счёт использования такого изгибного пьезоактуатора и высокоинтенсивного пучка СИ, проведён эксперимент по регистрации КДО от модельного образца Si(220).

Рентгенооптическая схема эксперимента включала в себя двукратный монохроматор станции Si(111), настроенный на энергию 12 кэВ, коллимирующие щели размером 100×100 мкм, изгибный пьезоактуатор с образцом, генератор управляющего электрического сигнала переменной поляр-

ности и систему детектирования на основе сцинтилляционного детектора и многоканального анализатора. На адаптивный изгибный элемент подавался резонансный синусоидальный сигнал частотой 4.64 кГц, а многоканальный анализатор был настроен на однократное накопление интенсивности за полный период колебаний изгибного элемента. Использование такой схемы позволило реализовать регистрацию целой КДО с помощью изгибного элемента за $\tau = 108$ мкс.

Достигнутое временное разрешение позволяет сделать вывод о перспективности применения таких элементов для времяразрешающих рентгенодифракционных *in situ* и *in operando* исследований динамики необратимых процессов и при изучении образцов, в том числе в условиях внешних воздействий.

Результаты работы опубликованы в статье: Marchenkov N., et al. *LiNbO₃ Based Bimorph Piezoactuator for Fast X-Ray Experiments: Resonant Mode //Sensors and Actuators A: Physical. -2019. -V.293. -P.48-55.*

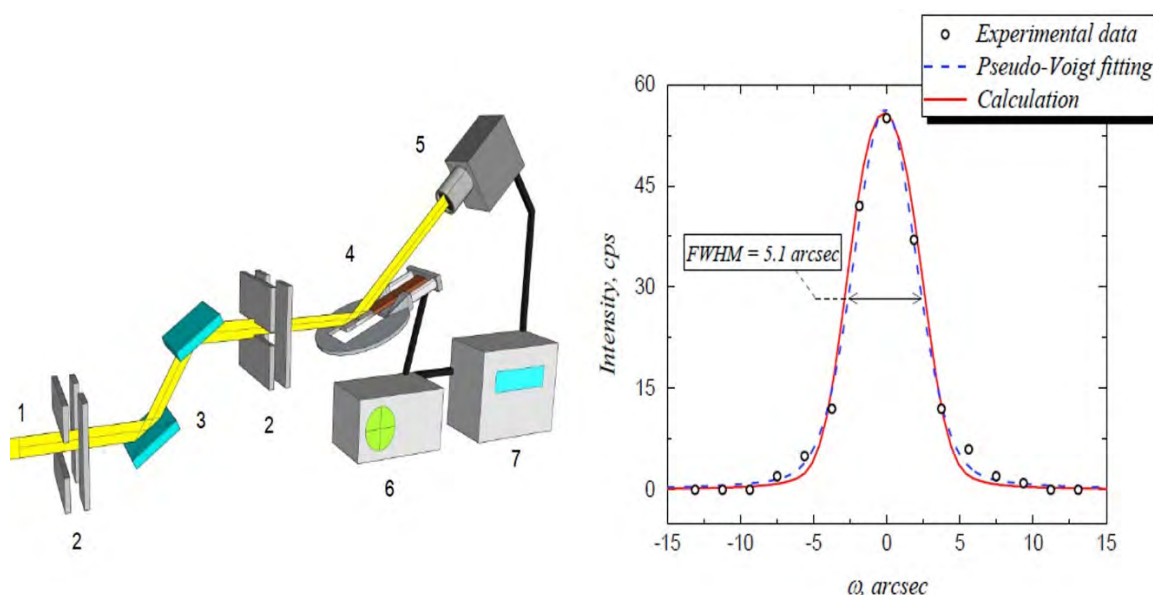


Рис. 2.3. Слева схема эксперимента: 1 — излучение из поворотного магнита, 2 — коллимирующие щели, 3 — двухкристальный монохроматор станции, 4 — изгибный адаптивный рентгенооптический элемент с образцом, 5 — детектор, 6 — управляющий генератор, 7 — многоканальный анализатор. Справа наложение экспериментальной и расчётной кривой дифракционного отражения Si(220), время измерения 108 мкс.

2.2. Развитие экспериментальной базы ИР-8

Новые помещения нейтронного зала

Большие планы в развитии экспериментальной базы для проведения нейтронных исследований в ККСНИ связаны с запуском источника холодных нейтронов (ИХН). Создание ИХН с нейтронной системой и нейтронными станциями на реакторе ИР-8 ведётся в рамках выполнения федеральной целевой программы: «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы».

В 2019 г. практически завершены строительные и отделочные работы помещений, предназначенных для размещения нейтронной системы и новых нейтронных установок: спектрометра малоуглового рас-

сеяния холодных нейтронов (МУРХН); дифрактометра для исследования микрообразцов под высоким давлением (МИКРО); рефлектометра поляризованных нейтронов (РЕФРА). Территориально новые помещения находятся в одном комплексе зданий с экспериментальным залом реактора ИР-8 и лабораторными комнатами. Дополнительно создан проход из зала реактора в новые рабочие помещения. Такое проектное решение сделало внутреннее устройство комплекса зданий логичным и удобным для сотрудников (рис. 2.4).

Новые помещения и экспериментальная база для нейтронных исследований на реакторе ИР-8 спланированы так, чтобы рабочая нагрузка не сказывалась отрицательно на качестве проведения нейтронных экспериментов и безопасности сотрудников.

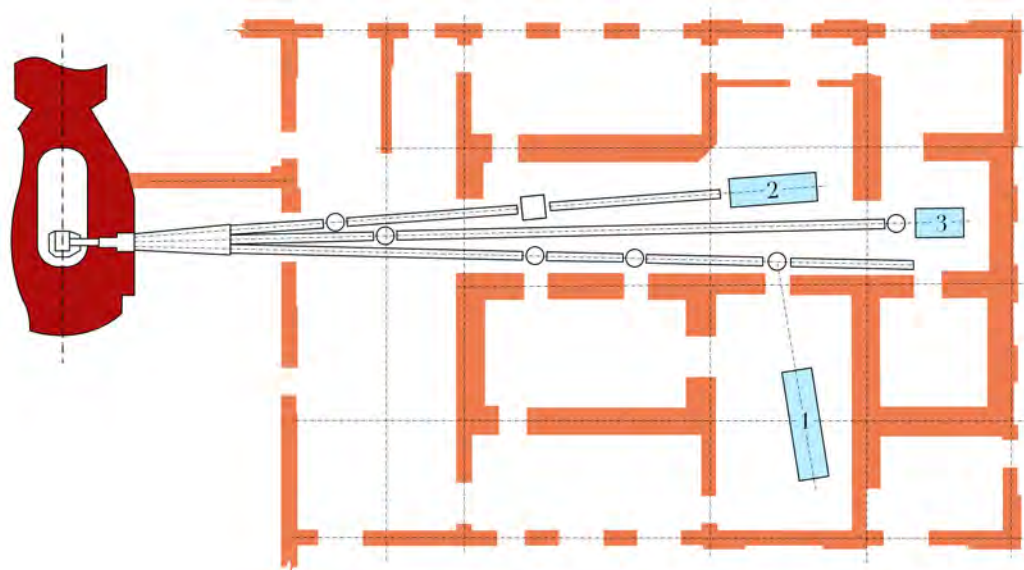


Рис. 2.4. План новых помещений нейтронного зала на реакторе ИР-8, с указанием места расположения нейтронных установок: 1 — РЕФРА; 2 — МУРХН; 3 — МИКРО

Нейтронные исследования остаточных напряжений в международном стандартном образце VAMAS

Для сравнения различных нейтронных стресс-дифрактометров и оценки возможностей нейтронного метода, в рамках международного программы VAMAS (Versailles Project on Advanced Material and Standards), был создан стандартный образец, содержащий модельные внутренние напряжения. В программе VAMAS TWA-20 приняли участие крупнейшие нейтронные центры Европы, Японии и США. Целью данного исследования являлось проведение аттестации нейтронного стресс-дифрактометра, базирующегося на реакторе ИР-8 (Станция СТРЕСС, УНУ НИК ИР-8).

Стандартный образец VAMAS представляет собой составной цилиндр диаметром 50 мм и высотой 50 мм, изготовленный из алюминиевого сплава Al7050 (рис. 2.5 а). За счёт тугой посадки поршня в полый цилиндр в образце возникают остаточные напряжения. Для получения необходимой при расчётах информации о параметре решётки d_0 материала в ненапряжённом состоянии использовался идентичный поршень, изготовленный из того же листа алюми-

ния. Измерения проводились на расстоянии 20 мм от основания цилиндра вдоль диаметра сечения. Результаты измерений согласуются с данными, полученными на других современных нейтронных стресс-дифрактометрах при затрате такого же времени на эксперимент.

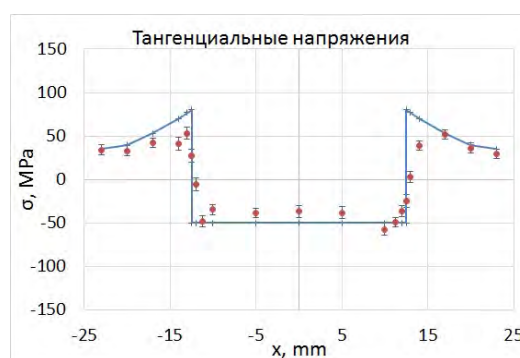
На рис. 2.5 б) приведён график тангенциальных остаточных напряжений, а также их расчётные теоретические значения. Данные демонстрируют, как растягивающие напряжения во внешнем цилиндре сменяются на сжимающие в зажатом внутри поршне. Отклонения от теоретических кривых обусловлены в первую очередь сильной текстурой образца, изготовленного из листового проката, не прошедшего термическую обработку.

Проведённые эксперименты показали, что нейтронный дифрактометр СТРЕСС позволяет проводить исследования напряженно-деформированного состояния в массивных поликристаллических образцах на мировом уровне.

Результаты работы опубликованы в статье: *И.Д. Карпов и др.. Измерение остаточных напряжений в международном стандартном образце VAMAS на дифрактометре СТРЕСС реактора ИР-8, Дефектоскопия № 4, 2019, с. 61*



(а)



(б)

Рис. 2.5. а) стандартный образец VAMAS и соответствующий ему d_0 -образец б) тангенциальная компонента тензора напряжений. Красные точки – экспериментальные данные, сплошная линия – расчёты по аксиально-симметричной модели

Часть II

Научная деятельность комплекса

Глава 3

Избранные научные результаты

Катализаторы Pt/C и $Pt/SnO_x/C$ для электроокисления этанола

Паровой риформинг углеводородов или спиртов используется для крупномасштабного производства водорода. Электролиз водных спиртов, в частности, этанола, был предложен в качестве метода расщепления для производства водорода в топливных элементах, так как он потребляет меньше энергии, чем электролиз воды. Однако метод имеет некоторые ограничения из-за вялой кинетики окисления алкоголя и быстрого отравления активных центров катализаторов продуктами диссоциации этанола.

Биметаллические катализаторы $PtRu$ и $PtSn$ считаются одними из наиболее эффективных благодаря их бифункциональному механизму, где диссоциативная адсорбция этанола происходит только на активных центрах платины, а олово в форме ок-

сида способствует адсорбции и диссоциации воды с образованием окислительных интермедиатов и защищают активные центры Pt от адсорбции частиц OH при высоких потенциалах.

На станции НаноФЭС «КИСИ-Курчатов» был проведен анализ биметаллических катализаторов на углеродном носителе Pt/C и $Pt/SnO_x/C$. Полученные данные (рис. 3.1) позволили установить валентные состояния олова в составе биметаллических наночастиц, а также сделать выводы о роли оксида олова при диссоциации этанола.

Результаты работы опубликованы в статье: *Pushkarev et al., "Pt/C and Pt/SnO_x/C Catalysts for Ethanol Electrooxidation: Rotating Disk Electrode Study," Catalysts, vol. 9, no. 3, p. 271, Mar. 2019.*

doi: 10.3390/catal9030271

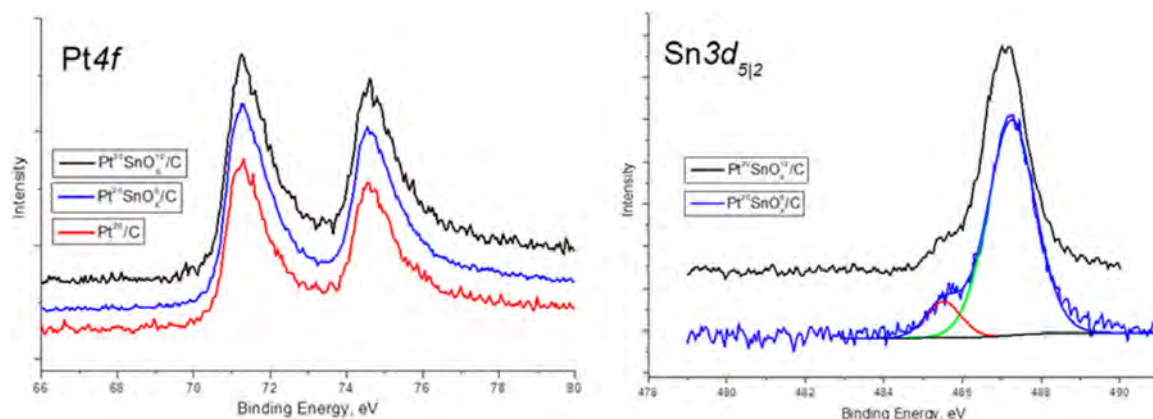


Рис. 3.1. РФЭС-спектры $Sn3d_{5/2}$ и $Pt4f$ для образцов Pt^{20}/C (только $Pt4f$), $Pt^{20}/SnO_x^8/C$ и $Pt^{20}/SnO_{20}/SnO_x^8/C$

Исследование черепа ювенильного пситтакозавра из раннемелового местонахождения Тушилгэ (Монголия)

Пситтакозавры являются широко распространённой в нижнемеловых отложениях Азии группой рогатых динозавров. Большинство находок происходят из местонахождений на территории Монголии и Китая.

В 1979 году отрядом СМПЭ под руководством С.М. Курзанова на местонахождении Тушилгэ были обнаружены фрагменты костей пситтакозавров, которые не были изучены до настоящего времени. Недавняя техническая обработка материала показала, что в сборах присутствуют два неплохо сохранившихся черепа небольших размеров, один из которых ассоциирован с разрозненными фрагментами посткраниального скелета. Ювенильный череп имеет размеры 5 см в длину и 4,2 см в ширину, другой, более крупный 10 см в длину и 7 см в ширину.

Ювенильный череп (рис. 3.2.) был изучен методом синхротронной томографии на экспериментальной станции ЛИГА «КИСИ-Курчатов». Применялось фильтрованное излучение с максимумом спектра около 56 кэВ, размер вокселя составил 25 мкм.

Предварительное определение на основании ряда морфологических признаков показало, что образец из Тушилгэ может принадлежать к виду *Psittacosaurus mongoliensis* на основании ряда морфологических признаков. *Psittacosaurus* остаётся самым многочисленным по количеству видов родом среди всех динозавров, даже не смотря на признание части из них невалидными. Дифференциация и установление филогенетических отношений между ними является довольно сложной задачей и требует постоянного пересмотра существующих коллекций, среди которых могут быть достаточно интересные и не описанные образцы. Дальнейшее использование методов синхротронной томографии может помочь существенно продвинуться в решении этих задач.

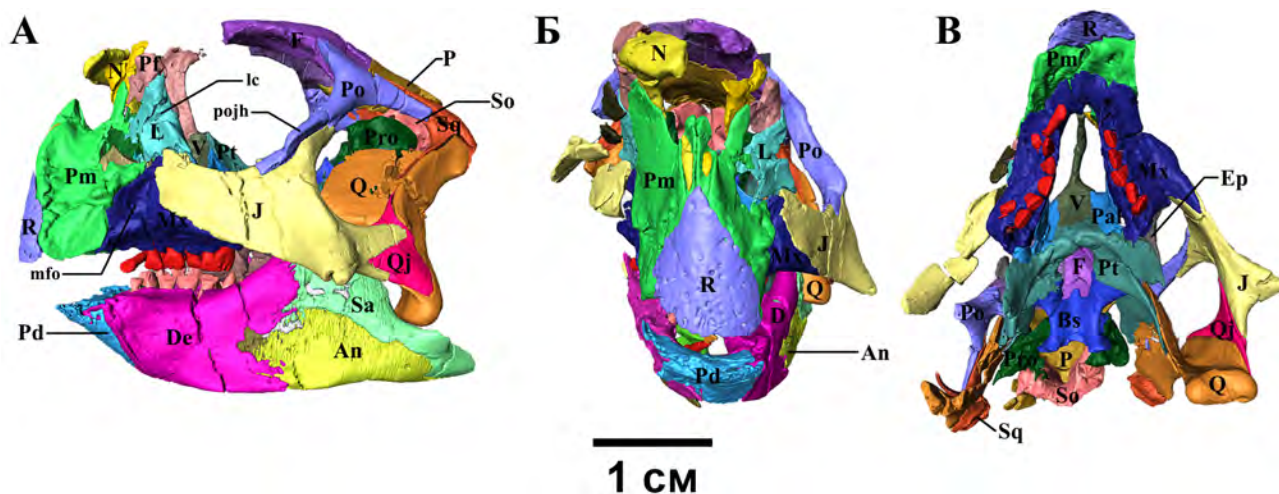


Рис. 3.2. Трёхмерная модель черепа ювенильного пситтакозавра из Тушелгэ: А – вид сбоку слева, Б – вид спереди, В – вид снизу (без нижней челюсти)

Анализ структуры и морфологии гибридных полимерных нанокомпозиционных материалов на основе поли-п-ксилена и теллурида свинца

Нанокомпозиты поли-п-ксилилен с теллуридом свинца (ППК-РbTe) синтезируются в форме тонких, до 1 мкм, плёнок на субстратах кремния. Для определения структуры нанокомпозита и его ориентации на подложке использованы методы дифракции в геометрии скользящего падения (GID) и рентгеновской рефлектометрии (XRR).

Кристалличность полимерной матрицы, а также пространственное распределение, размер и степень окисления наночастиц непосредственно влияет на электромагнитные свойства материала и могут использоваться для создания нового класса материалов – тонкоплёночных нанокомпозитов на основе поли-п-ксилилена с металлическими галогенидными наночастицами – многофункциональных наносенсоров широкого профиля (тактильных, микромагнитных, электрочувствительных и химических, состава окружающей среды).

Методами GID и XRR на синхротронной станции Ленгмюр «КИСИ-Курчатов» были изучены структурные особенности нанокомпозитных плёнок ППК-РbTe, полученных методом полимеризации из газовой фазы.

Принципиальная особенность данных плёнок заключается в том, что первый этап синтеза происходит при криогенных темпе-

ратурах, и рост неорганических включений начинается с мельчайших фракций материала, помещённых в матрицу мономера. Что, в частности, может приводит к формированию частиц, с заметным искажением кристаллической решётки, а также низкомолекулярных кластеров с сильно неравновесной структурой.

Из полученных дифрактограмм для плёнок чистого теллурида свинца (рис. 3.3) видно, что процесс напыления неорганической компоненты в ростовой установке идёт без деструкции филлера, поскольку эти плёнки сохраняют исходную кристаллическую структуру объёмного материала. Добавление полимера приводит к существенному уширению дифракционных пиков филлера. При большем содержании полимера наблюдается пик, связанный с кристаллической бета-фазой ППК. Используя стандартное выражения Дебая-Шеррера, были оценены средние размеры областей когерентного рассеяния. Из оценок следует, что добавление полимера приводит к уменьшению среднего размера ОКР с 5 до 1 нм.

Кривые рентгеновской рефлектометрии демонстрируют систематическое уменьшение первого критического угла, который в общем случае пропорционален плотности исследуемой пленки. Отмеченная тенденция к уменьшению плотности композита согласуется с увеличением содержания полимера. Кроме того, по осцилляциям (Kiessing fringes) для образца РТ-48 был оценён порядок толщин исследуемой серии плёнок.

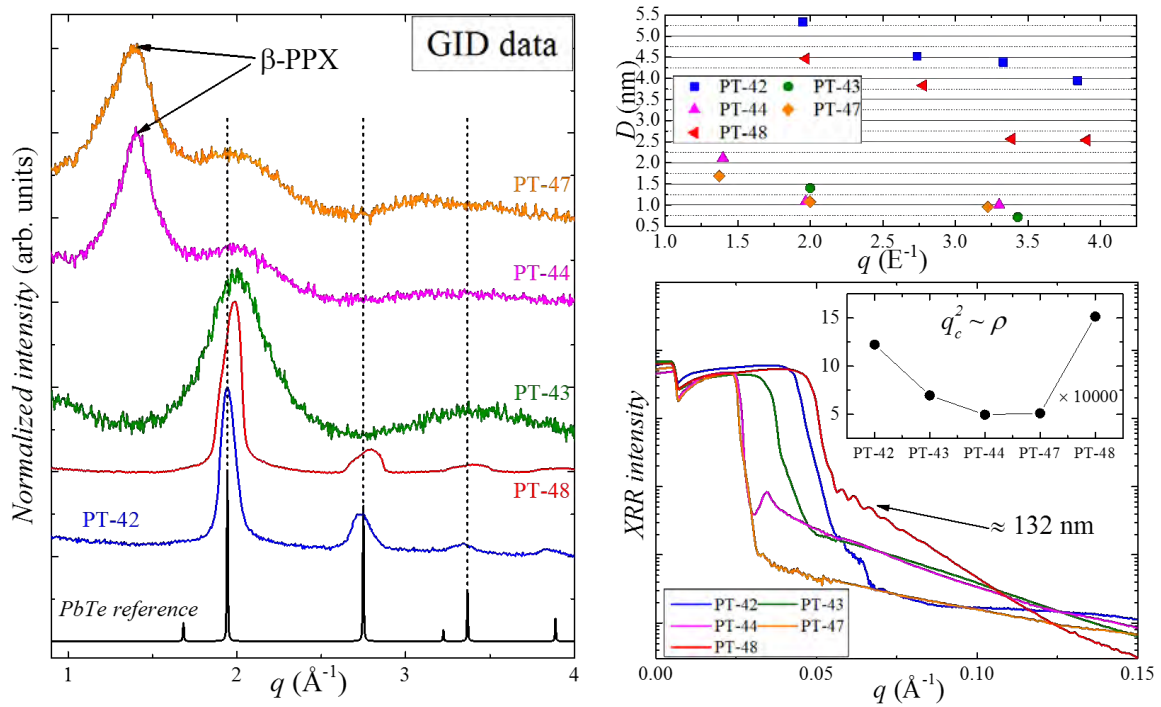


Рис. 3.3. экспериментальные данные, полученные от образцов РТ-42, РТ-43, РТ-44, РТ-47, РТ-48 методом рентгеновской дифракции в геометрии скользящего падения и методом рентгеновской рефлектометрии

Магнитотвёрдые наночастицы гексаферрита стронция, покрытые кремнием

Стабильные коллоиды из магнитотвёрдых частиц — новые и очень перспективные материалы. Поверхностная функциональность этих частиц остаётся непростой задачей, поскольку частицы имеют тенденцию к агрегации из-за сильных магнитных взаимодействий.

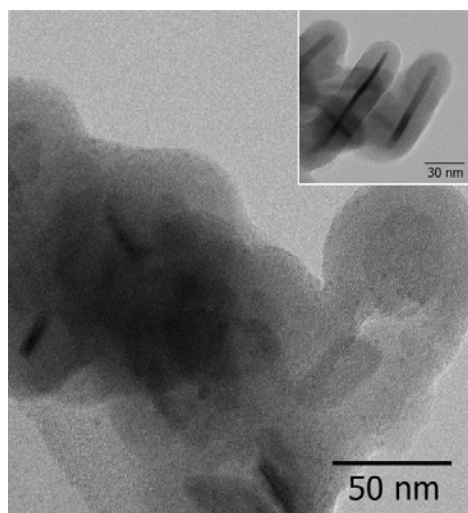
Синтезированные магнитные наночастицы гексаферрита стронция были покрыты оксидом кремния путём гидролиза тетраоксисилана (рис. 3.4). В качестве источника гексаферрита были использовали стабильный коллоид пластинчатых наночастиц со средним диаметром 40 нм и толщиной 5 нм, которые были получены стекло-керамическим способом. Используемый метод позволил успешно покрыть каждую частицу гексаферрита индивидуально, благодаря обеспечению гетерогенного образования зародышей кремнезёма со скоростью, превышающей скорость агрегации коллоид-

ных наночастиц.

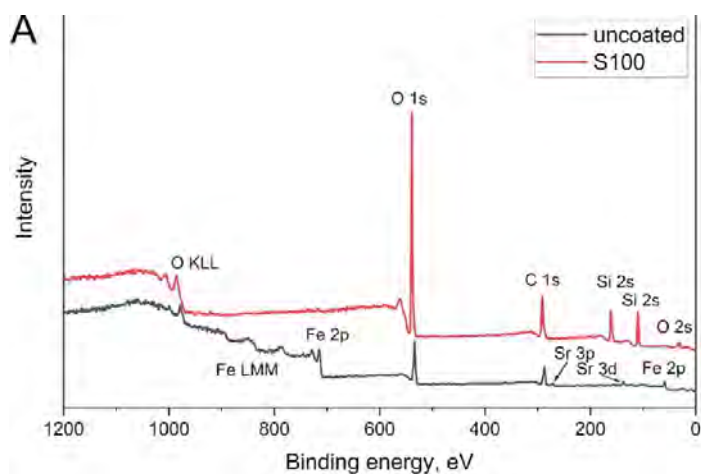
На станции НаноФЭС «КИСИ-Курчатов» методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии был проведён анализ серии синтезированных наночастиц гексаферритов стронция, что позволило подтвердить химический состав наночастиц и успешность их полного покрытия оксидом кремния.

Синтезированные наночастицы могут быть использованы в качестве магнитных сорбентов или наноконтейнеров, они являются очень перспективными коллоидными строительными блоками для различных магнитно собранных наноструктур. Кроме того, капсулированные кремнием наночастицы биосовместимы и могут найти применение для адресной доставки лекарств и тераностики.

Результаты работы опубликованы в статье: *E. O. Anokhin et al., "Silica coated hard-magnetic strontium hexaferrite nanoparticles," Advanced Powder Technology, vol. 30, no. 9, pp. 1976–1984, Sep. 2019. doi: 10.1016/j.appt.2019.06.016.*



(а)



(б)

Рис. 3.4. Просвечивающая электронная микроскопия магнитотвёрдых наночастиц, покрытых кремнием (слева), и фотоэлектронные спектры наночастиц с покрытием кремнием и без него (справа)

Исследование структур мультифункциональных МОКП на основе додеканоядерных Zn (II) карбоксилатных колёс

Металлоорганические координационные полимеры (МОКП) представляют собой новый класс микропористых твёрдых тел, которые интенсивно изучаются в течение последних двух десятилетий в связи с их структурным и функциональным разнообразием, что позволяет потенциально применять их в качестве газовых адсорбентов, люминесцентных датчиков, каталитических, оптически активных и магнитных материалов.

Макроциклические молекулы являются универсальной платформой для селективного молекулярного распознавания посредством слабых, но многочисленных комплементарных супрамолекулярных взаимодействий. Криптанды, краун-эфиры, каликсарены, циклодекстрины, кукурбитурилы и т.д. являются хорошо известными классами макроциклических кавитандов. Они обеспе-

чивают обширные возможности для супрамолекулярной химии из-за перестраиваемого диаметра и/или химического окружения полости для создания сильного межмолекулярного взаимодействия и лучшей селективности молекулы адсорбента по отношению к конкретной гостевой молекуле или иону.

На станции РСА «КИСИ-Курчатов» была исследована серия новых МОКП на основе Zn(II)-тиофен-2,5-дикарбоксилата. Изученные МОКП обладают высокой степенью селективности в процессе разделения различных смесей газов, в том числе бензола и циклогексана (более 98.5%) и азота и углекислого газа (более 98%). Определены структуры новых уникальных металлоорганических каркасов на основе додеканоядерных Zn (II) карбоксилатных колёс, а структура одного из каркасов решена с бензолом в качестве молекулы-гостя, находящейся в поре основной структуры. Достигнуто разрешение 0.77 Å. Это позволяет выявить особенности взаимодействия бензола с каркасом, отвечающие за высокую селективность фильтра.

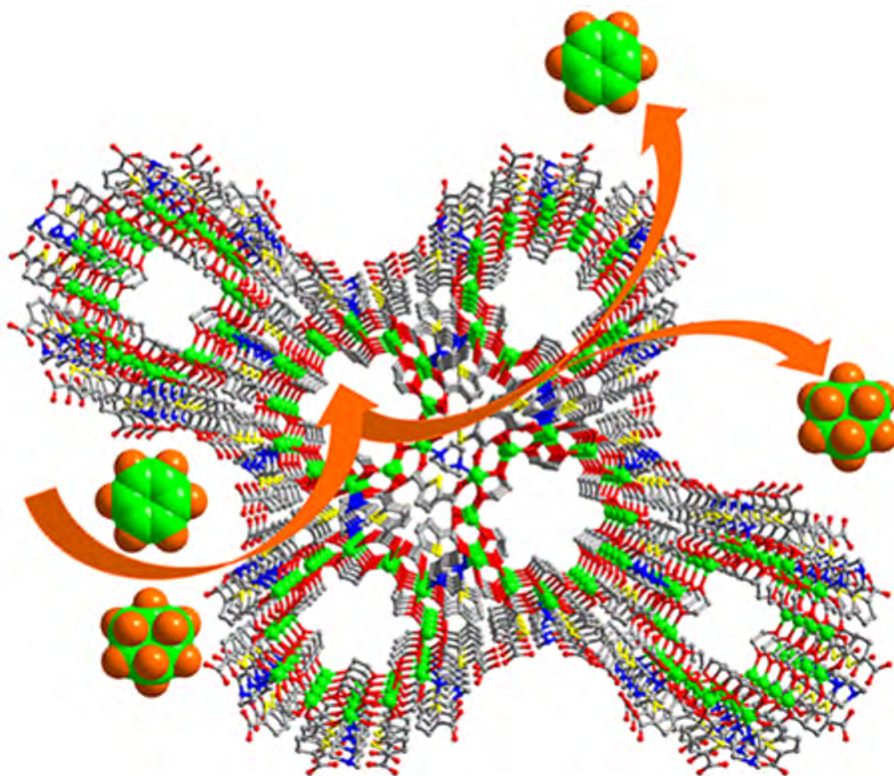


Рис. 3.5. Схематическое изображение процесса разделения бензола и циклогексана в порах МОКП

Иерархическая структура комплексов хитозана с металлическими наночастицами

Металлсодержащие нанокомпозиты на основе биополимера хитозана — класс гибридных материалов, представляющий особый интерес для биомедицины. Это связано, прежде всего, с уникальным набором свойств самого полисахарида: биодegradируемость, биосовместимость, антимикробная активность. Пористые композиции хитозана могут быть использованы в качестве систем доставки лекарственных препаратов, а также ранозаживляющих средств. Антимикробными свойствами обладают и наночастицы металлов, включаемые в биополимерную матрицу. Как известно, в ряде случаев антимикробная активность металлических наночастиц может превосходить активность антибиотиков, кроме того, большинство патогенных микроорганизмов не имеет на сегодняшний день «иммунитета» по отношению к действию наночастиц. Все выше перечисленное стимулирует создание новых нанокомпозитных материалов на

основе хитозана и разработку методов их получения.

Плёнки на основе хитозана были синтезированы с использованием оригинального многостадийного процесса. Золи наночастиц серебра и золота в различных растворителях (изопропанол, ацетон) получены методом металл-парового синтеза. Ими модифицировали хитозан двух видов — с малой молекулярной массой (20 кДа) и со средней молекулярной массой (50—190 кДа). В результате получены Ag- или Au-содержащие порошковые нанокомпозиты хитозана. Успешное введение металла в матрицу хитозана подтверждено методом рентгеновской дифракции на станции РСА. Плёнки формировались путём растворения Ag или Au-содержащего порошкового нанокомпозита хитозан в уксусной кислоте и последующей сушке на воздухе. Для изучения особенностей структуры данных плёнок на станции БиоМУР «КИСИ-Курчатов» проведены измерения малоуглового рассеяния в широком диапазоне векторов рассеяния от 0.03 до 10 nm^{-1} .

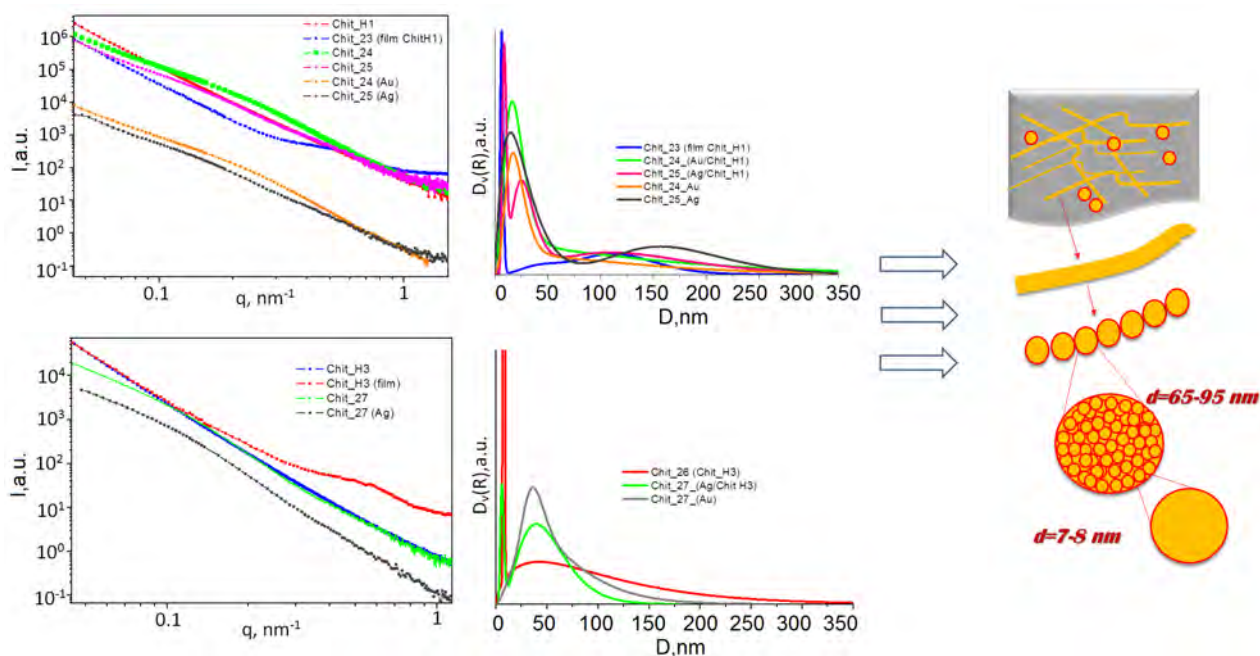


Рис. 3.6. Иерархическая структура композитного материала на основе хитозана по данным МУРР

В результате проведённого анализа кривых рассеяния с помощью программного пакета ATSAS (EMBL) для всех образцов определены размерные характеристики металлических наночастиц и пор (форма, размер, дисперсность) в биополимерной матрице (рис. 3.6). Выявлено, что размеры пор исходных хитозановых матриц намного больше размеров внедрённых наночастиц, что говорит о неполном заполнении пор, хотя ранее предполагалось полное заполнение. Показано, что в порошках наночастицы агломерируют в метастабильные агрегаты — от нескольких до нескольких тысяч единиц. При формировании плёнок происходит их перераспределение. Установлено, что природа растворителя определяет эффективность редисперсии агрегатов. Редисперсия выше у изопропанола. Следовательно, можно говорить о возможности контроля размера внедряемых наночастиц за счёт изменения параметров синтеза с целью

исключения больших агрегатов, что требуется для дальнейших медицинских применений. Также обнаружено, что наночастицы золота менее склонны к агрегации, чем серебро. То есть, природа металла определяет его склонность к агрегации. В нанокомпозитах с серебряными наночастицами размер агрегатов всегда выше и достигает 175 нм. При этом показано, что тип растворителя и структура матрицы не влияют на кристалличность и распределение по размерам наночастиц металла внутри матрицы хитозана.

Результаты работы опубликованы в статье: *Rubina M.S. et. al. Preparation and characterization of biomedical collagen-chitosan scaffolds with entrapped ibuprofen and silver nanoparticles. // Polymer Engineering and Science, Vol. 59, № 12, pp. 2479-2487 (2019). <https://doi.org/10.1002/pen.25122>*

Анализ совершенства монокристалла алмаза методом синхротронной топографии с угловой развёрткой

Исследовалось структурное совершенство монокристалла алмаза, выращенного по методу НРНТ. Исследования проводили на станции Медиана. Изображения асимметричного лауэвского отражения (111) кристалла алмаза записывались с помощью двухкоординатного детектора на основе матрицы CCD размером 4008×2672 , $GdOS : Tb$ -экрана с размером пиксела 8,9 мкм. В качестве монохроматора для расширения пучка использовался плоский кристалл кремния с фактором асимметрии отражения $b = 0.1$, отражение 511, $\lambda = 0.56 \text{ \AA}$. Съёмка заключалась в получении серии изображений при разных углах поворота кристалла. Получение локальных кривых

качания, выполнялось путём выделения области интегрирования размером 10×10 пикселей на всех кадрах серии и построения зависимости интеграла по выделенной области от угла.

В объёме кристалла наблюдаются различные дефекты. Во-первых, это линейные дефекты — дислокации. Наблюдаются как одиночные дислокации, так и группа из четырёх дислокаций, образующих стенку. Во-вторых, двумерные дефекты, идентифицированные как границы доменов. С помощью данного метода получены карты распределения максимума интенсивности отражения (рис.3.7.а) и ширины кривой качания (рис.3.7.б), измерены кривые качания в разных точках кристалла (рис.3.7.с). В наиболее совершенной его части она соответствует расчётной (1.7 угл.с.). Данные свидетельствуют о возможности применения кристалла для преобразования поляризации синхротронного излучения.

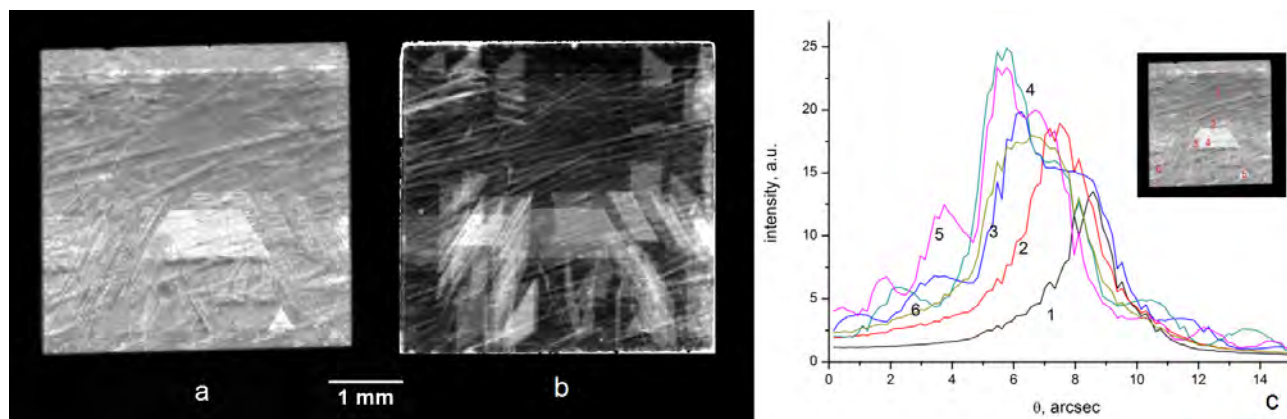


Рис. 3.7. Топограммы – карты максимума интенсивности (а), ширины кривой качания (б) и кривые качания в разных точках кристалла (с)

Изучение бронзовой иконки-подвески из Суздальского Ополя методами синхротронной и нейтронной визуализации

В работе представлено исследование бронзовой иконки-подвески, происходящей из селища у с. Семеновское-Советское, расположенного в 20 км от Суздаля, обнаруженной во время работ Суздальской археологической экспедиции Института археологии РАН. находка датируется XII — первой половиной XIII в. Иконка (рис. 3.8. а) имеет эмалевое покрытие с изображениями Христа Эммануила (сторона 1) и св. Нестора (сторона 2). Целью исследования являлась реконструкция авторских приёмов изготовления иконки, а также оценка сохранности металлической основы и эмалевого слоя с применением неразрушающих методов.

Нейтронная томография позволила получить полную картину внутреннего строения объекта. Вместе с тем значительный размер иконки в поперечном направлении в сочетании с высоким поглощением синхротронного излучения в бронзе не позволил получить аналогичную полную картину

в синхротронном излучении. Поэтому синхротронные исследования были проведены в скользящей геометрии, когда ось вращения объекта была перпендикулярна эмалевым поверхностям иконки, и излучение распространялось преимущественно в эмалевых слоях, что позволило изучить их строение на глубину около 400 мкм от поверхности. Таким образом, сочетание нейтронной и синхротронной томографии позволило получить взаимодополняющую картину внутреннего строения эмалевых слоёв иконки на двух типах излучения, а строение бронзовой подложки было изучено с помощью нейтронной томографии.

В результате исследований установлено, что изображения выполнены перегородчатой техникой, причём после расплавления эмалевой массы перегородки были частично удалены или утрачены. Кроме томографии, это подтверждается повышенной концентрацией меди в эмали у границ цветов, что предполагает использование медного сплава для их изготовления. Сохранность и расположение фрагментов перегородок на стороне 2 свидетельствуют о внесении правок в изображение в процессе изготовления иконки.



Рис. 3.8. Фотографии иконки. Стрелками отмечены участки, где сохранились фрагменты перегородок под слоем эмали

Влияние дейтерия на фазовые превращения в смеси фуллеренов C₆₀/C₇₀ после воздействия высоких температур и давлений

Целью работы было исследование влияния малой концентрации дейтерия (2 ат.%) на фазовые превращения смеси «аморфных» фуллеренов C₆₀ с 50% масс. C₇₀ (aC₆₀C₇₀D) при ВТ иВД. Спечённые при ВТ (до 1100 °) и давлении, 8 ГПа, компакты из aC₆₀C₇₀D с добавкой дейтерия (2 ат.%) имели вид таблетки диаметром 5 мм и высотой 2-3 мм.

Используя нейтронную дифракцию (станция ДИСК ИР-8) (рис. 3.9), спектроскопию комбинационного рассеяния и просвечивающую электронную микроскопию высокого разрешения исследовано влияние низких концентраций дейтерия (2 ат.%) на фазовые превращения при высоких температурах (до 1100°C) и высоком давлении 8 ГПа aC₆₀C₇₀D и показано, что малая добавка дейтерия:

1. Ускоряет превращение этой смеси при высоких температурах (до 1100°C) и высоком

давлении 8 ГПа в разупорядоченную графитоподобную фазу (РГПФ) и кристаллический графит.

2. Существенно меняет структуру образовавшегося РГПФ, предотвращая образование в нем графитовых нанокластеров, уменьшая искажения, унаследованные от смеси "аморфных" фуллеренов, и изменяя степень анизотропии этой "аморфной" фазы.

3. РГПФ, полученный при спекании смеси "аморфных" фуллеренов C₆₀ с 50% масс. C₇₀ без добавления дейтерия имеет разупорядоченную структуру, содержащую два типа графитовых нанокластеров с разными значениями межплоскостного расстояния, d_{002} , а введение дейтерия в исходную смесь фуллеренов предотвращает образование таких нанокластеров.

Результаты работы опубликованы в статье: *M.S.Blanter et al. Effect of deuterium on phase transformations in a mixture of amorphous-like fullerenes C₆₀/C₇₀ (50/50) at high temperature and pressure. Materials Chemistry and Physics. 251 (2020).*

<https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2020.123094>.

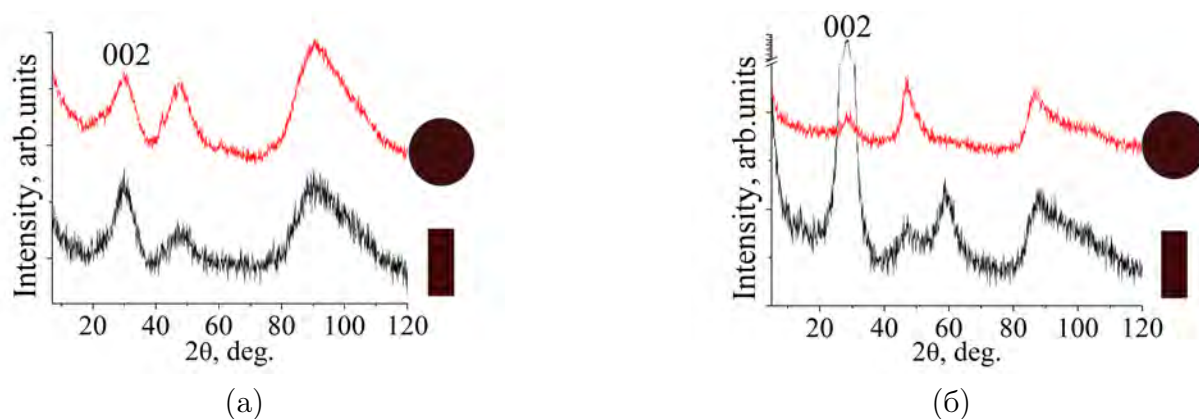


Рис. 3.9. Дифракционные картины РГПФ в синтезированном компакте без добавления дейтерия (слева) и с дейтерием, 2 ат.%, (справа) aC₆₀C₇₀ при температуре 800°C и давлении 8 ГПа. Положение образца относительно падающего пучка нейтронов обозначено следующим образом: круг — по нормали к плоскости образца-таблетки, прямоугольник — образец-таблетка поставлена на ребро. 002 — указывает на положение 2θ — интенсивной линии графита

Измерения остаточных напряжений в модельных металлических образцах, изготовленных методом прямого лазерного выращивания

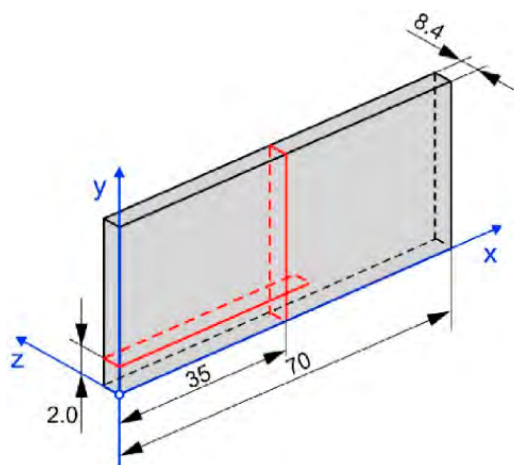
Прямое лазерное выращивание является передовой технологией аддитивного производства металлических изделий, позволяющей частично или полностью исключить этапы механической постобработки и сварочных работ. Сам производственный процесс заключается в послойном наплавлении металла и характеризуется неравномерным локальным нагревом заготовки, вызывающим формирование остаточных деформаций и напряжений в материале, которые оказывают сильное влияние на точность изготовления детали и её характеристики. Цель данного исследования состояла в изучении картины распределения остаточных напряжений в образцах, каждый слой которых сам по себе является составным и изготавливается за несколько проходов. В таком случае перераспределение внутренних напряжений происходит не только при нанесении последующих слоёв материала, но и в рамках одного слоя, что

существенно осложняет численное моделирование происходящих процессов.

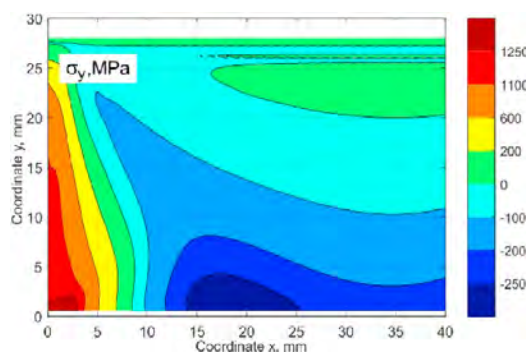
Образец, представляющий из себя пластинку толщиной 8,4 мм (рис. 3.10. а), был выращен на жёсткой подложке из титанового сплава Ti-6Al-4V. Анализ экспериментальных данных позволил установить, что край пластинки вблизи подложки находится под действием растягивающих напряжений для всех 3-х главных компонент тензора напряжений. Причём нормальная компонента напряжений (σ_y) превышает предел текучести материала на 25%. Поперечная компонента напряжений (σ_z) в этой же точке достигает половины предела текучести.

Благодаря проведённым исследованиям на станции СТРЕСС ИР-8, была подобрана и верифицирована модель для численных расчётов остаточных напряжений в таких изделиях методом конечных элементов (рис. 3.10 б), позволяющая получить адекватные результаты, находящиеся в согласии с экспериментальными данными.

Результаты работы опубликованы в статье: *S.Ivanov et al. Stress distribution in laser metal deposited multi-layer thick-walled parts of Ti-6Al-4V, Procedia Manufacturing 36 (2019) 240-248*



(а)



(б)

Рис. 3.10. а) Схема модельного образца. Красным обозначены области измерений; б) Карта распределения нормальной компоненты напряжений в исследованной пластинке, рассчитанная методом конечных элементов

Трансформация магнитной и доменной структуры при спин-переориентационном переходе в ферримагнетике Tm_2Fe_{18}

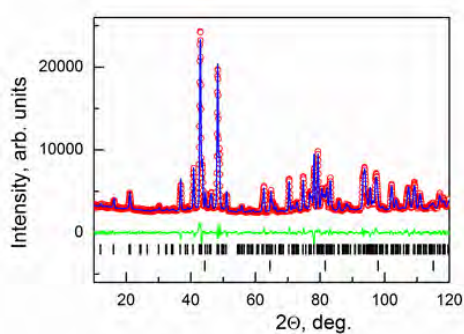
Соединения R_2Fe_{17} представляют значительный практический и научный интерес как материалы для постоянных магнитов и как модельные объекты для проверки теоретических представлений при анализе магнитных свойств металлических магнетиков. Наряду с высокими температурами Кюри (T_C) в некоторых из них величина энергии магнитной анизотропии сравнима по величине с энергией обменных взаимодействий между редкоземельной и 3d-подрешётками. К таким соединениям относится соединение Tm_2Fe_{17+x} .

Кристаллическая и магнитная структура интерметаллического соединения Tm_2Fe_{18} была исследована в широком температурном интервале от 3 К до комнатной температуры. Были использованы методы нейтронной дифракции, синхротронного излучения и ультрамалоуглового рассеяния нейтронов. Было найдено магнитострикционное поведение параметра a и объёма решётки. Магнитная структура является ферримагнитной во всем интервале температур.

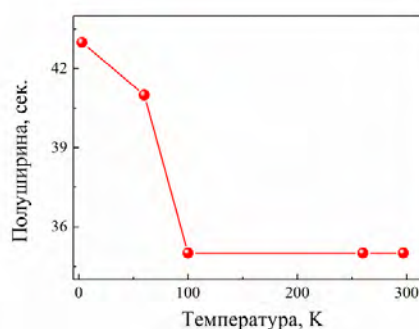
Однако в области низких температур порядка 70-80К найден спин-переориентационный переход типа лёгкая ось — лёгкая плоскость. Дана теоретическая интерпретация перехода и определены величина и температурная зависимость первых констант магнитной анизотропии для подрешёток железа и тулия.

Методом ультрамалоуглового рассеяния нейтронов на станции СТОИК ИР-8 были получены экспериментальные данные о доменной структуре и её трансформации при спин-переориентационном переходе. Разработана теория преобразований доменной структуры при фазовых переходах ориентации, которая находится в качественном согласии с экспериментальными данными. Показана возможность использования рассеяния нейтронов под ультрамалыми углами для диагностики спин-переориентационных фазовых переходов в ферри- и ферромагнитных материалах.

Результаты работы опубликованы в статье: Valiev E. Z. et al. *Neutron Diffraction Studies of the Transformation of Magnetic and Domain Structures upon Spin-Reorientation Transition in the Tm_2Fe_{18} Ferrimagnet* // *Physics of Metals and Metallography*. – 2019. Т. 120. – №. 4. – С. 313-319.



(а)



(б)

Рис. 3.11. а) Экспериментальная (красные кружки), обчисленная (синяя линия) нейтронограмма сплава Tm_2Fe_{18} при комнатной температуре. Внизу расположена разностная зелёная кривая между расчётом и экспериментом. Штрихами отмечены местоположения рефлексов основной фазы (верхние) и примесной $\alpha - Fe$ (нижний ряд); б) Зависимость ширины кривой малоуглового рассеяния нейтронов на образце Tm_2Fe_{18} от температуры

Новые подходы к конструированию кристаллических материалов: супрамолекулярные клетки на основе металлокластеров каликсаренов

Мировые тенденции в развитии современных технологий направлены на установление фундаментальной связи между структурой кристаллического материала и его функциональными свойствами, в частности, магнитными, каталитическими, адсорбционными и т.д. В этом контексте наноразмерные металлокластеры и клетки обладают уникальными физико-химическими свойствами, которые существенно отличаются от соответствующих характеристик свободных ионов и твердых тел.

Супрамолекулярные взаимодействия, управляющие процессами самоагрегации молекулярных динамических систем является одним из удобных и подходящих инструментов для решения проблем дизайна новых кристаллических материалов, в том числе, металл-органических структур различной размерности, с заданными функциональными свойствами. Поэтому установление новых принципов управления супрамолекулярной структурой кристаллических материалов на атомном уровне и является основной научной проблемой данного проекта и полностью соответствует одному из направлений Стратегии НТР РФ.

В ходе выполнения проекта в отчётном году были получены следующие результаты:

1. Синтезированы структуры монокристаллов новых марганцевых комплексов на основе каликс[4]арена в присутствии вспомогательных лигандов хелатного типа: альфа-пиридилметанол, тиакаликс[4]арен. Полученные соединения были изучены на станции РСА «КИСИ-Курчатов» методом рентгеноструктурного анализа что продемонстрировало эффективность используемого подхода для дизайна новых мономолекулярных магнитов. (рис. 3.12).

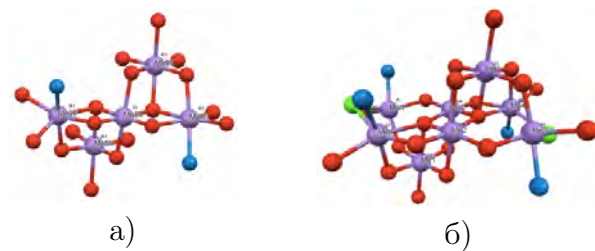


Рис. 3.12. Кластерное ядро марганцевых комплексов а) $[Mn_5]$, б) $[Mn_8]$.

2. Впервые был получен и изучен с помощью РСА смешанный гексаядерный кластер из катионов марганца на основе взаимодействия различных по природе каликсаренов (классического каликсарена и тиакаликсарена), что расширяет возможности для целенаправленного дизайна молекулярных магнитов за счёт использования различных по природе молекул каликсаренов (рис. 3.13)

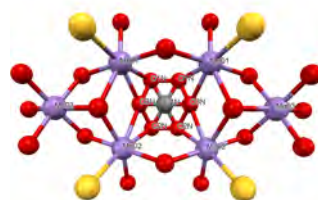


Рис. 3.13. Кластерное ядро марганцевого комплекса $[Mn_6]$.

3. Впервые получена и изучена с помощью РСА кристаллическая фаза гетерометаллического комплекса состава $[Tb_2Mn_2]$ на основе тиакаликсарена. Доказано, что варьирование различных по природе d/f металлов в кластерном ядре $[Tb_2Mn_2]$ может быть использовано в дальнейшем для настройки магнитных свойств материала (рис. 3.14) .

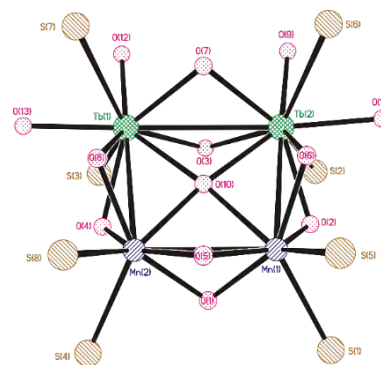


Рис. 3.14. Кластерное ядро комплекса $[Tb_2Mn_2]$.

Работа выполнялась совместно с КФУ в рамках гранта РНФ_ОИ 19-73-20035.

Физические закономерности образования локальных атомных конфигураций и их влияния на физико-химические и механические свойства аморфных и упорядочивающихся металлических материалов под воздействием больших пластических деформаций: эксперименты с использованием методов EXAFS и EELFS спектроскопии

Изучение магнитно-мягких аморфных сплавов является одним из важных направлений в физике конденсированного состояния. Как правило, аморфные магнитно-мягкие сплавы (АММС) на основе ферромагнитных компонентов имеют более высокие магнитные характеристики, чем кристаллические аналоги, и являются более прочными при комнатных температурах. Ряд свойств АММС, например, высокая магнитная проницаемость, малая магнитная анизотропия (на два порядка ниже таковой для кристаллических сплавов), высокое удельное электросопротивление, вследствие которого значительно снижаются потери на токи Фуко, напрямую связана с их неупорядоченным строением и не может быть достигнута в кристаллических сплавах. Однако, как и все аморфные сплавы, полученные закалкой из расплава (ЗР), АММС метастабильны, поэтому уникальные свойства таких материалов заметно изменяются при внешних воздействиях и особенно резко в случае протекания структурно-фазовых превращений с переходом исходного материала в аморфно-кристаллическое состояние. Большой интерес вызывает вопрос, каким образом могут изменяться локальная атомная структура и магнитные свойства АММС в экстремальных условиях кручения под высоким давлением (КВД) при различных температурах и деформациях. Для решения этой задачи мы предприняли попытку обстоятельно, на экспериментальном уровне изучить эволюцию локальной атом-

ной структуры аморфных ферромагнитных материалов на основе железа в ходе КВД.

В работе исследовали АММС на основе Fe с одинаковым содержанием B : $Fe_{50}Ni_{33}B_{17}$, $Fe_{54}Ni_{29}B_{17}$, $Fe_{58}Ni_{25}B_{17}$ и $Fe_{75}Si_8B_{17}$. При приготовлении сплавов использовались компоненты высокой чистоты, которые измельчались и смешивались в необходимых пропорциях. Все сплавы в аморфном состоянии деформировали методом КВД до значения деформации, соответствующей $n = 1$, (n – число полных оборотов подвижной наковальни) при комнатной температуре (293K) и температуре кипения жидкого азота (77 K). Магнитные свойства определялись при комнатной температуре с помощью вибрационного магнитометра фирмы Lake Shore модель 7407 в полях до 1.7 Т. Спектры поглощения выше К-краёв поглощения Ni и Fe измерялись на экспериментальной станции Структурное материаловедение Курчатовского источника синхротронного излучения в режиме пропускания при комнатной температуре. Обработка спектров EXAFS проводилась с помощью программного комплекса VIPER. В дополнение к Фурье-анализу, с целью уточнения присутствия лёгких (Si, B) и тяжёлых (Fe, Ni) атомов в ближайших координационных сферах локального окружения атомов Ni и Fe, был проведён вэйвлет-анализ EXAFS-спектров.

Сопоставление экспериментально выявленных изменений локальной атомной структуры исследованных сплавов после КВД при 77K показывает что КВД при 77K сплавов $Fe_{58}Ni_{25}B_{17}$ и $Fe_{75}Si_8B_{17}$ приводит к изменению композиционного ближнего порядка у атома Fe , с уменьшением средних межатомных расстояний пар атомов $Fe - Fe$, $Fe - Si$ и $Fe - Ni$, при этом удельная намагниченность насыщения уменьшается по сравнению с исходным аморфным состоянием в 1.5 раза для сплава $Fe_{58}Ni_{25}B_{17}$ и в 1.7 раза для сплава $Fe_{75}Si_8B_{17}$.

Работа выполнялась совместно с ЦНИИ Чермет им. И. П. Бардина в рамках гранта РНФ_ОИ №19-72-20066.

Соединения включения на основе пористых металл-органических каркасов: структура, реакционная способность и функциональные свойства

Одним из важнейших направлений современной химии и материаловедения является изучение пористых металл-органических каркасов (metal-organic framework, MOF). Интерес к пористым металл-органическим координационным полимерам обусловлен, прежде всего, перспективами их широкого практического применения в качестве компонентов для нового поколения функциональных материалов с уникальными характеристиками. Одним из важнейших направлений изучения является использование таких материалов для процессов очистки и разделения. Существующие промышленные процессоры потребляют колоссальные количества энергии, и даже в странах — мировых лидерах более 50 процентов потребляемой в промышленности энергии расходуется на процессы разделения и очистки. Создание новых, энергетически малозатратных процессов селективного разделения сложных промышленно важных смесей является актуальной задачей. Проект РНФ направлен на разработку нового поколения сорбентов на основе пористых металл-органических каркасов, способных решать задачи разделения таких важных для нефтехимии процессов, как разделение бензола и циклогексана, разделение изомеров ксилолов, выделение индивидуальных углеводородов из сложных по составу промышленных смесей, разработку новых сорбентов для селективного улавливания и хранения углекислого газа, метана, водорода.

В рамках проведённого исследования получены пористые каркасы для высокоселективного разделения бензола и циклогексана. На станции РСА «КИСИ-Курчатов» удалось расшифровать структуры монокристаллов соединений типа гость — хозяин (гость — бензол, параксилол). Анализ направленных высокоспецифичных взаимодействий гостевых молекул с каркасом позволяет выявить причину высокоселективно-

го разделения. Направление получения изоретикулярных пористых каркасов и координационных полимеров с узкими одномерными каналами выглядит очень перспективным для получения новых материалов, в которых можно не только локализовать гостевые молекулы рентгеноструктурным методом, но и использовать полученные данные для разработки новых систем для высокоэффективного разделения близких по свойствам органических молекул. Таким образом, устанавливаются механизмы взаимодействия гостевых молекул с пористыми матрицами и предлагаются пути целенаправленного получения и (или) улучшения функциональных свойств материалов.

Для понимания причин высокоселективного разделения было проведено рентгеноструктурное исследование монокристаллов с использованием источника синхротронного излучения для образцов соединений включения бензола в каркасе с NO_2 -группами в терефталатных линкерах. В структуре один тип упорядоченных молекул бензола расположен перпендикулярно плоскости ароматического кольца бипиридинового линкера. Также в структуре остаётся достаточно места по форме и объёму для другой молекулы бензола, которое занято диффузной электронной плотностью. Таким образом, как и в случае сорбции паров бензола, мы получаем до двух молекул C_6H_6 на формульную единицу каркаса. Внимательно изучая расположение молекулы бензола, можно найти два типа слабых взаимодействий, которые способствуют его упорядочению в определенной позиции в полостях металл-органического каркаса (рис. 3.15).

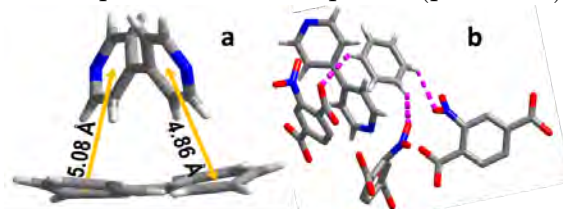


Рис. 3.15. Локализация молекулы бензола в каркасе $[\text{Li}_2\text{Zn}_2(\text{R} - \text{bdc})_3(\text{bpy})](\text{R} = \text{NO}_2)$. Показаны дополнительные стабилизирующие взаимодействия.

Работа выполнялась совместно с ИИХ им. А.В. Николаева СО РАН в рамках гранта РНФ_ОИ №19-73-20087.

Молекулярный дизайн гетерогенных катализаторов для производства, хранения и транспортировки высокочистого водорода

Проблема отсутствия эффективных технологий хранения и транспортировки водорода ограничивает использование водорода в качестве энергоносителя. Для решения проблемы необходимо разрабатывать эффективные катализаторы селективного гидрирования и последующего дегидрирования углеводородов. В проекте были синтезированы биметаллические Ni-Mo — катализаторы с разным содержанием никеля и

его отношением ко второму металлу — молибдену. Катализаторы были охарактеризованы методами *in situ* EXAFS и XANES. Для исследования на станции СТМ «КИСИ-Курчатов» было отобрано два образца $Ni - Mo/SiO_2$ с соотношением компонентов $Ni : Mo = 19 : 81(38Ni - Mo/SiO_2)$ и $38 : 62(38Ni - Mo/SiO_2)$. Запись спектров рентгеновского поглощения проходила после нагрева катализаторов в *in situ* ячейке до $500^\circ C$ в потоке $10\%H_2$ в азоте и последующей выдержке 20 мин.

Работа выполнялась совместно с ИК СО РАН в рамках гранта РНФ_ОИ №19-73-20020.

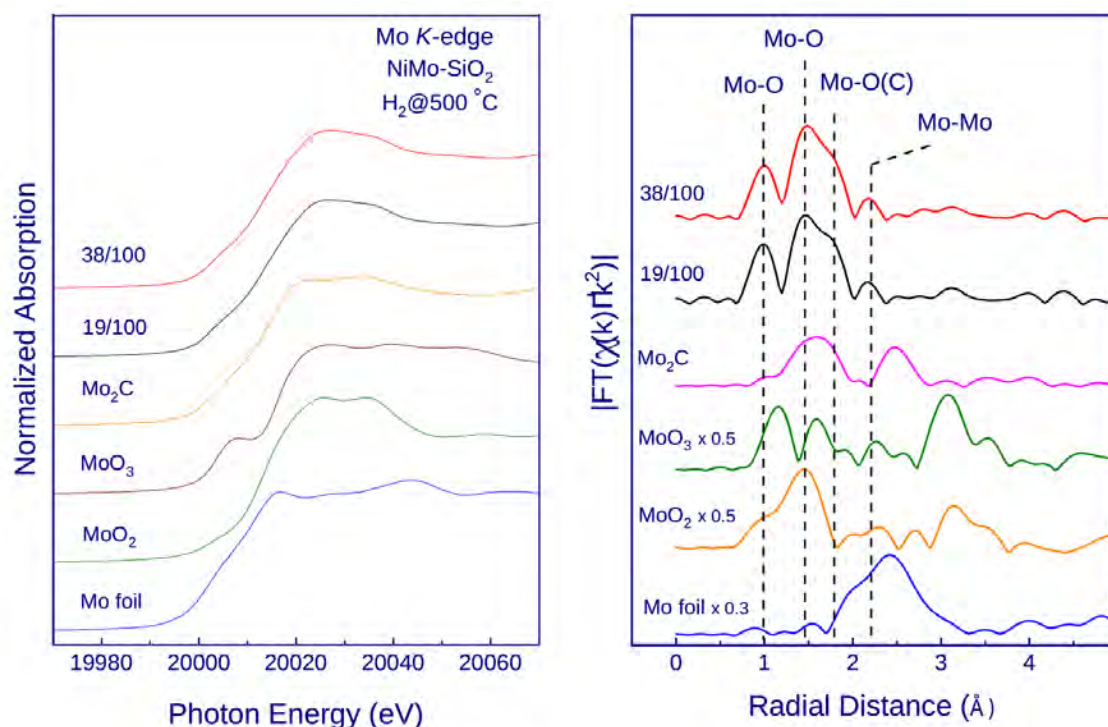


Рис. 3.16. Нормализованные XANES — спектры К-края Mo (слева) и модуль k^2 -взвешенных Фурье-трансформант $k^2\chi(R)$ EXAFS — спектров исследуемых образцов (справа) в сравнении со спектрами стандартов Mo , MoO_2 , MoO_3 и Mo_2C/SiO_2

Актиниды в объектах ядерного наследия

В рамках работы по проекту проведены комплексные исследования физико-химического состояния урана в радиоактивно загрязнённых грунтах сублиматного производства Акционерного общества «Ангарский электролизный химический комбинат» (СП АО «АЭХК»). Для исследования валентного состояния и локального окружения урана в отдельных фрагментах грунта – концентраторах урана, а также в образцах грунта целиком и в глинистой фракции грунта проводилась спектроскопия рентгеновского поглощения на краю UL_3 в вариантах околосредовой структуры (XANES) и протяженной тонкой структуры

(EXAFS) в режиме флуоресценции на станции СТМ «КИСИ-Курчатов». На основании анализа спектров рентгеновского поглощения (XANES) установлена степень окисления урана. Идентичность формы XANES-спектров UL_3 для валовой пробы грунта и глинистой фракции грунта показывают единство преобладающих форм урана во всем грунте и в отдельной тонкой фракции. Перегибы L_3 края U в исследуемых пробах и в стандартной пробе $U(VI)$ имеют одинаковое положение по энергетической оси, что свидетельствует о преимущественной форме U в грунте в виде катиона $(U^{VI}O_2)^{2+}$.

Работа выполнялась совместно с МГУ им. М. В. Ломоносова в рамках гранта РНФ_ОИ №19-73-20051.

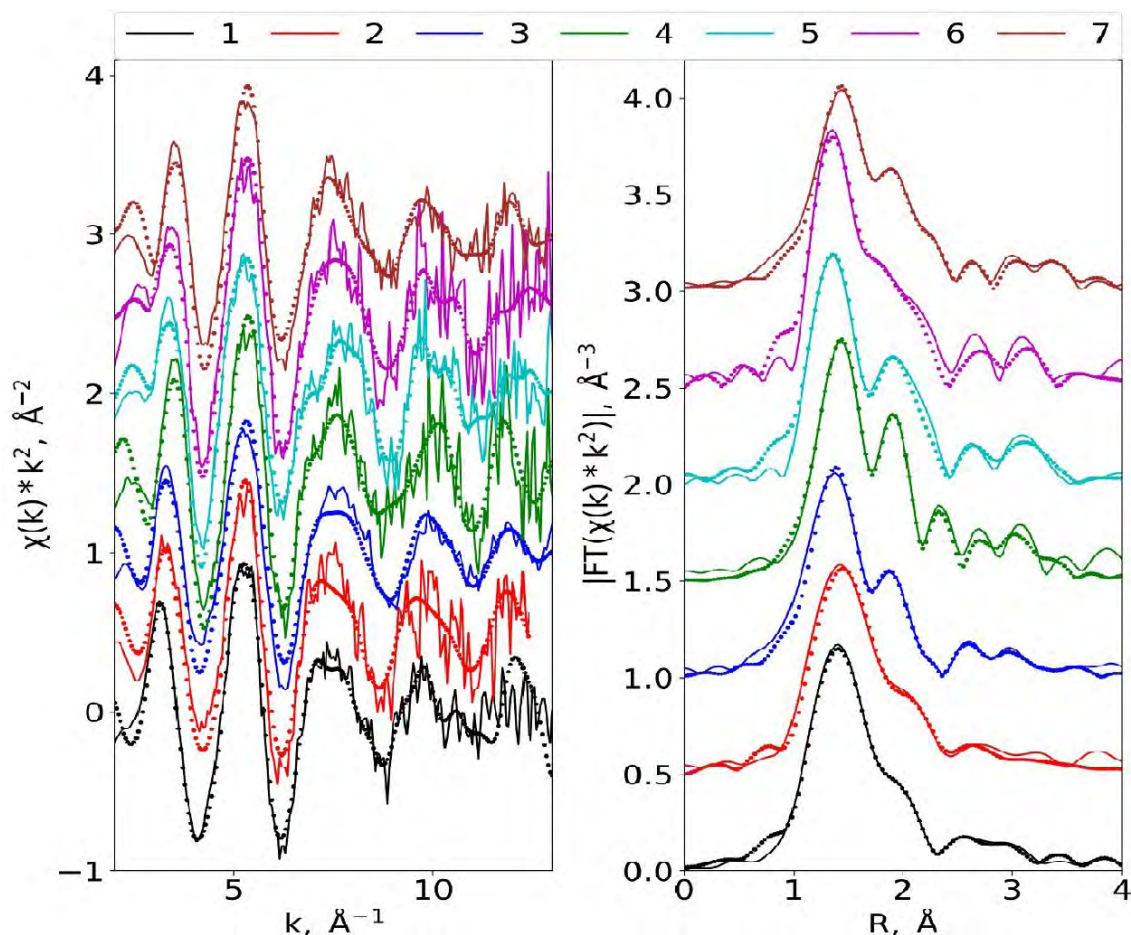


Рис. 3.17. EXAFS — спектры $U(VI)$ исследованных фрагментов грунта: слева — спектры EXAFS в k -пространстве, справа — абсолютная величина их Фурье-преобразований. Точками представлены экспериментальные результаты, линией — моделирование. На рисунке представлены спектры урана в следующих образцах: 1 — грунт; 2 — глинистая фракция; 3 — древесина; 4 — уголь; 5 — шлак с высоким содержанием железа; 6 — резина; 7 — растительные остатки

Совместимость и трансформация функциональных неорганических наночастиц с культурами клеток в формируемых *in vitro* гибридных материалах по данным синхротронных исследований реконструкции атомного и электронного строения

Совмещение неорганических наночастиц с биологическими структурами — клетками и молекулами, создание гибридных наноматериалов актуально во многих областях: спинтроника, тераностика, биосенсорика и многие другие. Принципиальным вопросом является изучение возможных трансформаций, стабильности состава, структуры и субструктуры, электронного строения и физико-химического состояния таких наночастиц при переходе в гибридные, в том числе природоподобные наноматериалы.

В проекте исследуются изменения структуры наночастиц оксидов железа и кремния, имеющих важные потенциальные применения, при их взаимодействии с клетками *E.coli* в локальном окружении атомов железа или кремния гибридных структур. Образцы изучались на станции НАНОФЭС «КИСИ-Курчатов», оснащённой самым современным оборудованием мирового класса, методами XANES и XPS с высоким разрешением.

Показано, что структуры на основе клеток *E.coli* (рис. 3.18. а) с частицами железа устойчивы к радиационным дозам используемых методов, включая электронную микроскопию и впервые применённую фотоэмиссионную спектроскопию РЕЕМ. Показана стабильность физико-химического состояния поверхности массива клеток (рис. 3.19. а).

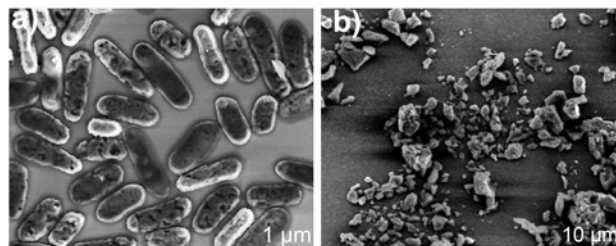


Рис. 3.18. РЭМ изображение (а) массива клеток *E. coli* расположенных на поверхности кремниевой подложки, (б) наночастиц кремния и их агломератов

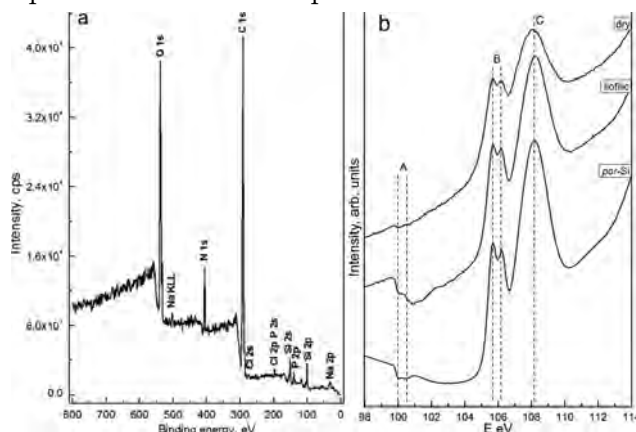


Рис. 3.19. (а) XPS массива клеток *E. coli*, обзорный спектр; (б) XANES агломератов наночастиц Si

Состав и структура исходных наночастиц кремния существенно зависят от технологии их формирования, сушки и хранения (рис. 3.18. а). Кремниевые частицы в клетках покрыты естественным оксидом, отличающимся характером плотности упаковки кремний-кислородных тетраэдров (рис. 3.19. б).

Работа выполнялась совместно с ВГУ в рамках гранта РФФ_ОИ №19-72-20180.

Результаты работы опубликованы в статьях:

Manyakin M.D. et al. *Electronic structure of stishovite SiO₂* // *Journal of Physics: Conference Series* 2019 Vol. 1352., № 1 — P. 012032 .

Turishchev S.Yu. et al. *On the possibility of PhotoEmission Electron Microscopy for E. coli advanced studies* // *Results in Physics* – 2020, Vol. 16 — P.102821.

Наноразмерные каталитические системы на основе фосфодопированных углеродных материалов

Нанесённые на углеродные подложки наноразмерные палладиевые катализаторы являются незаменимыми компонентами в производстве многих важных веществ, используемых в бытовой химии, фармацевтике и других областях. Взаимодействие металлических наночастиц с углеродной подложкой является ключевым фактором, определяющим свойства таких катализаторов. Понимание механизмов взаимодействия металлических частиц с активны-

ми центрами подложки может позволить управлять свойствами нанесённых на углеродные материалы катализаторов и в дальнейшем создать новые высокоэффективные каталитические системы. В качестве активных центров подложки могут выступать дефекты углеродной поверхности, а также специально введённые инородные атомы в допированных углеродных материалах. Одним из наиболее интересных и перспективных элементов для получения допированных углеродных материалов является фосфор. Для выявления закономерностей взаимодействия в системе важно было определить состояние фосфора и палладия в зависимости от условий синтеза материала.

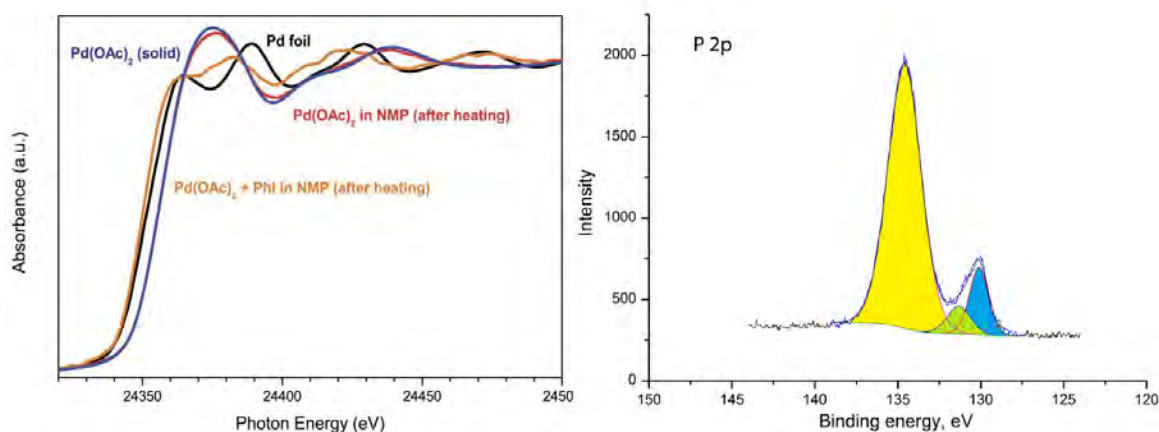


Рис. 3.20. Слева спектр рентгеновского поглощения вблизи краевой структуры (XANES) приготовленных коллоидных растворов и контрольных образцов, справа: РФЭС (P2p) полученного из 2,4,6-трифенилфосфорина фосфор-допированного углеродного материала

Химическое состояние палладия было определено на станции НАНОФЭС «КИСИ-Курчатов» с помощью рентгеновской абсорбционной спектроскопии (XAS). Показано, что происходит разложение исходного ацетата палладия и образование металлической фазы с примесью йодида палладия в модельных коллоидных системах. Различные *Pd*-содержащие фазы можно было различить и количественно определить с помощью расширенной спектроскопии тонкой структуры поглощения рентгеновских лучей (EXAFS) проведенной на станции СТМ «КИСИ-Курчатов». Там же был измерен спектр рентгеновского поглощения вблизи

краевой структуры (XANES) раствора ацетата палладия, нагретого без йодбензола, одного из реагентов исследуемой реакции. Этот спектр соответствовал спектрам исходного твёрдого предшественника палладия (рис. 3.20. а), что указывает на ключевую роль йодбензола в образовании стабильной металлической фазы в исследуемых реакциях кросс-сочетания.

Основной задачей исследования была разработка допированного фосфором углеродного материала. Обычно фосфор в допированных углеродных материалах легко окисляется до пятивалентного. Это затрудняет координацию палладия на неподелён-

ной электронной паре самого фосфора. Поэтому целью проекта было получить допированный углеродный материал, в котором фосфор сохранялся бы в трёхвалентном, не окисленном состоянии. Для этого в качестве предшественников использовались фосфорорганические соединения, в которых трёхвалентный фосфор находился в стабилизированном состоянии.

С помощью метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показано, что при использовании соединений с фосфором, встроенным в полиароматическую систему, фосфор окисляется до состояния 5+. В соединении 2,4,6-трифенилфосфорин фосфор был включён в шестичленный ароматический цикл, что предотвращает его окисле-

ние. В полученном в реакторе с микроволновым облучением допированном углеродном материале с помощью того же метода изучено валентное состояние фосфора. На спектре (рис. 3.20. б) присутствовало три сигнала, два из которых соответствуют неокисленным формам фосфора (131.4 эВ и 130.1 эВ). Кроме того, характер спектра РФЭС кислорода не указывал на наличие связи $P-O$. Таким образом, с большой долей вероятности, был получен углеродный материал с трёхвалентным фосфором, включённым в полиароматическую конденсированную систему.

Работа выполнялась совместно с ИОХ РАН в рамках гранта РФФИ №19-73-20124

Особенности строения, надмолекулярной организации и химических реакций самоорганизующихся карбосилановых и олиго-тиофенсилановых дендримеров в блочном состоянии и на межфазных границах раздела

В рамках настоящей работы получено прямое подтверждение изменения валентного состояния металлоцентра на основе краун-замещённого бис-фталоцианината церия и европия при сжатии в однослойных плёнках Ленгмюра-Блоджетт (ПЛБ). Для этого на станции СТМ «КИСИ- Курчатов» был применён метод спектроскопии рентгеновского поглощения вблизи краевой структуры (XANES) с использованием синхротронного излучения.

Измерения проводились на образцах ПЛБ с различной ориентацией комплекса и различными степенями окисления металлоцентра. XANES-спектры ПЛБ на основе редокс-изомеров с трёх- и двухвалентным состоянием металлоцентра заметно отличаются. Положения краёв поглощения согласуются с литературными данными для соответствующих состояний ионов евро-

пия и церия. Таким образом, в результате проведённых исследований получено новое прямое доказательство ранее обнаруженного нами эффекта редокс-изомеризации бис-фталоцианината европия на границе раздела фаз. Показана эффективность метода XANES для определения валентного состояния катионов металлов в двумерных супрамолекулярных системах.

Работа выполнялась совместно с МГУ им. М. В. Ломоносова в рамках гранта РНФ_ОИ №19-73-20236

Результаты работы опубликованы в статьях: *Shokurov A.V. et al. Fluorescence mode XANES spectroscopy as a powerful tool for redox-isomerism studies in ultrathin films Macroheterocycles 2019 12(3) 264.*

Шокуров В.В. и др. Первый пример регистрации редокс-изомеризации бис-фталоцианината церия в монослое методом XANES-спектроскопии. Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН – 90 лет. Сборник научных трудов. — М.: ИФХЭ РАН 2019.
Shokurov A.V. et al. Long-sought redox isomerization of europium(III/II) complex achieved by molecular reorientation at the interface Langmuir (2020 г.)

DOI: 10.1021/acs.langmuir.9b03403

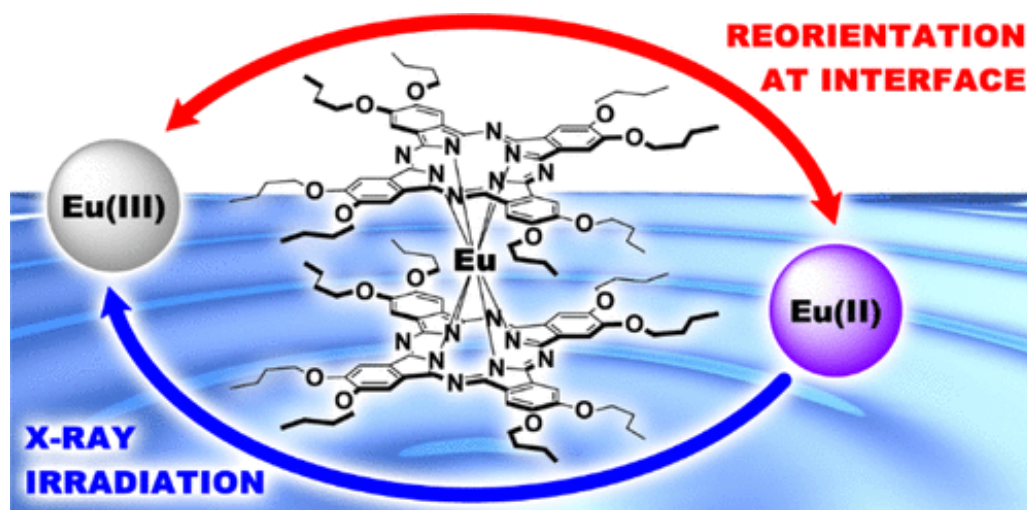


Рис. 3.21. Изменение валентного состояния металлоцентра в однослойных плёнках Ленгмюра-Блоджетт на основе краун-замещённого бис-фталоцианината европия при сжатии

Создание новых методов синтеза ценных органических соединений с помощью селективного каталитического образования связей углерод — углерод и углерод — гетероатом

Амиды являются важнейшим классом органических соединений, находящим применение в большом количестве областей. В частности, амидная связь встречается в структуре примерно 25% лекарственных субстанций. Поэтому разработка дешёвых и селективных подходов к синтезу амидов имеет большую фундаментальную и прикладную значимость. Ранее была показана возможность проведения реакции восстановительного амидирования на гомогенных родиевых катализаторах. Этот подход позволяет получать целевые вторичные амиды из альдегидов, производство которых хорошо отлажено в промышленности. Наиболее оптимальным прекатализатором восстановительного амидирования оказался коммерчески доступный ацетат родия.

В первую очередь был проведен скрининг коммерчески доступных гетерогенных катализаторов на основе родия и рутения

— наиболее активных металлов в реакциях восстановительного присоединения без внешнего источника водорода и выявлена наиболее активная комбинация металла и носителя. Им оказался родий на углеродной матрице. С помощью исследования методами БЭТ и ПЭМ показано, что морфология носителя и катализатора не оказывает решающего влияния на активность катализатора.

С помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС) на станции НАНОФЭС «КИСИ-Курчатов» было проведено исследование степени окисления родия (рис. 3.22). Спектры родия на углеродной матрице содержат два чистых ярко выраженных пика, которые соответствуют $Rh_2O_3 \cdot 5H_2O$. Напротив, фотоэлектронные спектры родия на угле и активированном угле имеют сложную форму, что указывает на наложение нескольких пиков. Исходя из положения этих пиков, в составе данного катализатора присутствуют частицы Rh , Rh_2O_3 и $Rh_2O_3 \cdot 5H_2O$. Соотношение интенсивностей равно 0.44/0.37/0.19 и 0.43/0.45/0.12 соответственно. Из этих данных следует, что наибольшую каталитическую активность в реакции восстановительного амидирования проявляет родий в степени окисления +3.

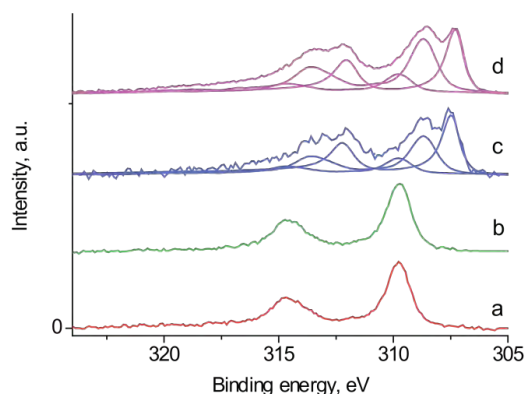


Рис. 3.22. 3d фотоэлектронный спектр Rh на углеродной матрице (a), Rh на углеродной матрице после высушивания в вакууме (b), Rh на угле (c) и Rh на активированном угле (d). Гладкие линии соответствуют компьютерному моделированию спектров родия в разных степенях окисления

Для полноты понимания процесса была исследована возможность вымывания родия с подложки. Для этого было проведе-

но исследование катализатора после реакции методом ТЕМ (рис. 3.23). При этом на углеродной матрице не было обнаруже-

но никаких следов металла. Данный эксперимент однозначно указывает на то, что в процессе реакции происходит вымывание металла, то есть родий на углеродной матрице по сути является прекурсором некоторого гомогенного «коктейля» из частиц родия, который и обладает каталитической активностью. Это дополнительно было подтверждено путём анализа отфильтрованного от катализатора раствора реакционной смеси методом атомно-эмиссионной спек-

троскопии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-АЭС).

Разобравшись с механизмом работы катализатора, была проведена дальнейшая оптимизация температуры, давления, концентрации и растворителя. При этом было показано, что наиболее оптимально проводить процесс при $150–160^{\circ}\text{C}$, под давлением не ниже 30 бар в диэтиловом эфире, причём разбавление положительно сказывается на выходе целевого продукта.

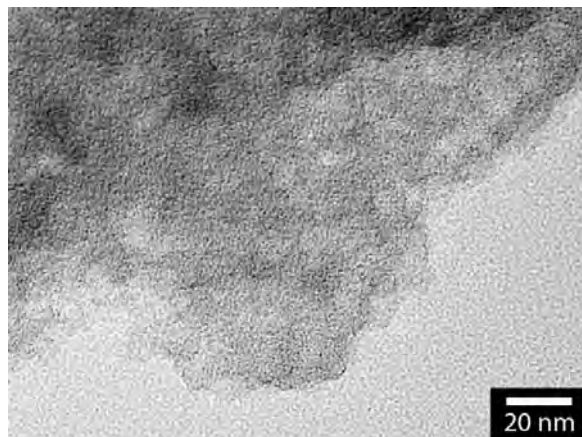


Рис. 3.23. ТЕМ родия на углеродной матрице после реакции

Найдя оптимальные условия, была исследована субстратная специфичность реакции. Процесс может быть проведён при использовании различных ароматических альдегидов, причём альдегиды с электроноакцепторной группой проявляют большую активность. Реакция чувствительна к стерической загруженности альдегида – при наличии заместителя в орто-положении к карбонильной группе выход снижается по сравнению с субстратами с заместителями в мета- и пара-положении. Другим ограниче-

нием реакции является невозможность использования алифатических альдегидов – они вступают в реакции самоконденсации, что приводит к образованию сложной смеси продуктов. Использование кетонов также приводят к низким выходам. При этом в реакцию хорошо вступают различные амиды, и отмечена устойчивость разных функциональных групп в условиях реакции.

Работа выполнялась совместно с ИНЭОС РАН в рамках гранта РФФИ_ОИ №19-73-20212

Управление взаимодействием лиганд-ДНК с использованием молекулярных фотопереклюателей

Целью исследований по настоящему проекту является разработка фотоуправляемых лигандов для связывания с ДНК и другими биомолекулами. В рамках проекта будут проведены разработка и синтез подобных систем, изучены фотохимические превращения соединений и взаимодействия основных и фотоиндуцированных форм с молекулами ДНК. В качестве объектов исследования были выбраны два класса соединений – производные стиролов и краун-соединений.

1. При изучении серии фотоактив-

ных стирилгетероциклов и продуктов их фототрансформаций кристаллы синтезированных соединений либо не удается получить вовсе, либо они имеют слишком малые размеры и игольчатую форму. На станции РСА «КИСИ-Курчатов» были определены кристаллические структуры новых, не описанных ранее соединений. Был осуществлён конформационный анализ металлокомплекса краун-эфира, производных 2-стирилбензотиазола и установлена структура продукта фотодимеризации 3-стирилпиридазина, подтвердившая гипотезу о протекании при его фотооблучении самопроизвольной, регио- и стерео-специфичной реакции $[2 + 2]$ -фотоциклоприсоединения с образованием одного из 11 возможных изомеров производного циклобутана стиролов.

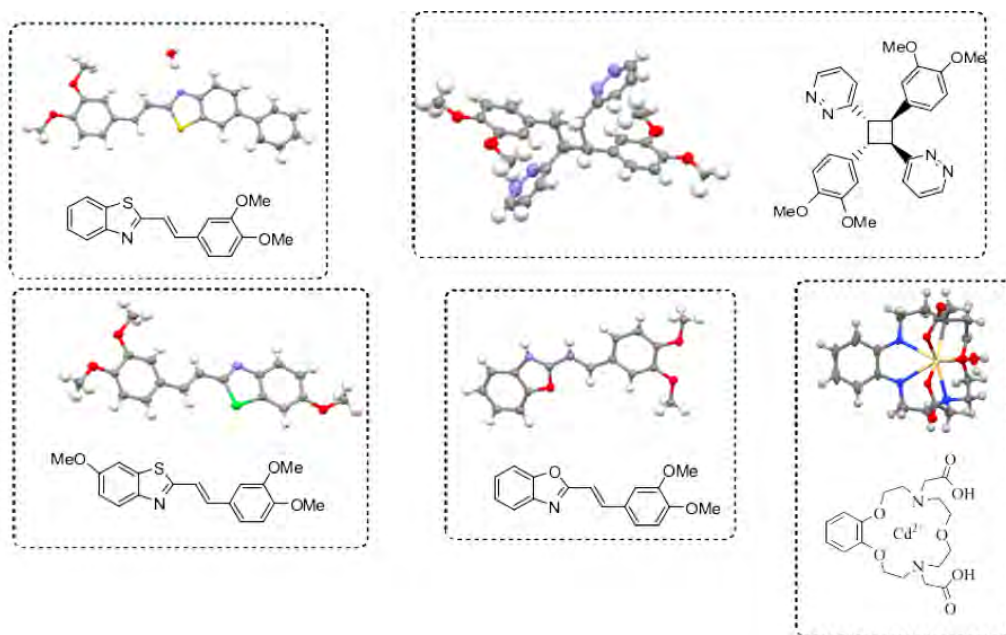


Рис. 3.24. Кристаллические структуры замещённого 2-стирилбензотиазола и продукта фотодимеризации 3-стирилпиридазина

2. Метод МУРР использовался для изучения образования комплексов органических молекул с ДНК. Изучение комплексобразования бис-стириловых красителей различной структуры с молекулой дц-ДНК проводилось на станции БиоМур «КИСИ-Курчатов». Использовались растворы дц-

ДНК тимуса телёнка в фосфатном буфере с концентрацией $C_{DNA} = 1.188$ моль/л и растворы красителей концентрацией $C_{LIG} = 5 \cdot 10^{-4}$ моль/л. Готовые растворы комплексов содержали $C_{LIG}/C_{DNA}=0.13$ (согласно результатам КД при таком соотношении агрегатов не наблюдалось).

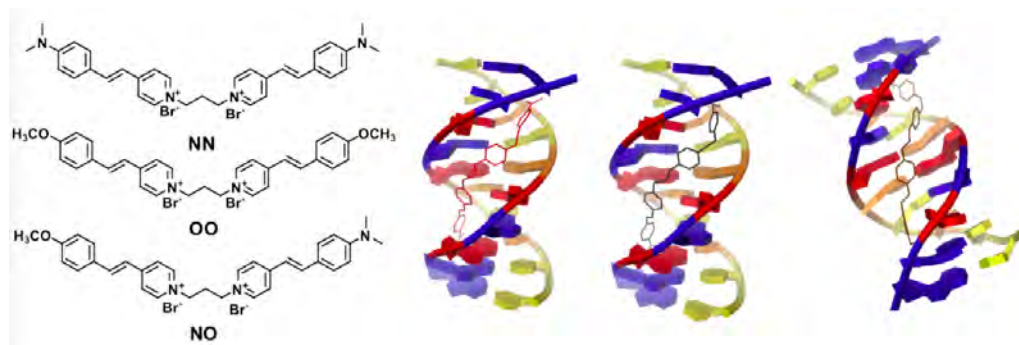


Рис. 3.25. Структуры исследованных бисстириловых красителей (NN, NO, OO) и предполагаемое расположение красителей в ДНК

Проведены исследования четырёх образцов: ДНК, ДНК-NO, ДНК-NN, ДНК-OO.

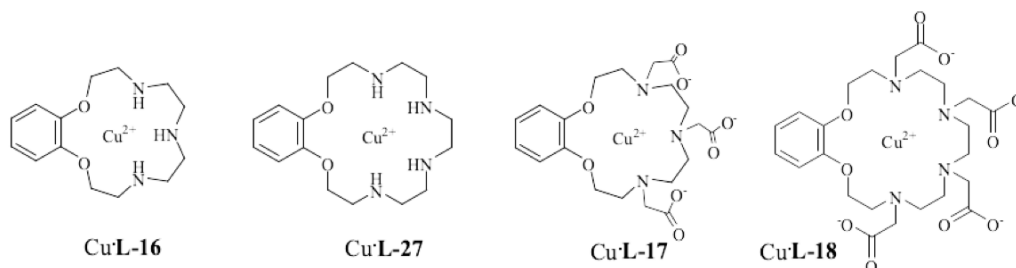
Для ДНК и ДНК-NO полученные функции $p(r)$ имеют двугорбую форму, с провалом посередине. Подобную форму имеют распределения расстояний для димеров. Размер субъединицы для образца ДНК-NO оказывается в два раза меньше, чем для образца ДНК.

Функция $p(r)$ образца ДНК-NN имеет пик при малых r , после чего наблюдается почти линейный спад до максимального рас-

стояния, равного 16 нм. Образец имеет форму нити.

Образец ДНК-OO - округлые частицы с характерным радиусом инерции $R_g = 3.6$ нм и максимальным размером 11 нм, что $\sim$ соответствует субъединице для образца ДНК. Это позволяет предположить, что в данном случае обработка образца предотвращает образование димеров в растворе.

3. В ряде красителей содержатся краун-эфирные фрагменты, способные к координации катионов металлов, например, меди.



Методом EXAFS-спектроскопии на станции СТМ «КИСИ-Курчатов» было исследовано зарядовое состояние и локальная структура атомов меди в четырёх модельных соединениях. Получено локальное окружение с расстоянием порядка $1.97 \text{ \AA}$ для комплексов $Cu \cdot L16$ и $Cu \cdot L27$ и $1.95 \text{ \AA}$ для $Cu \cdot L17$ и $Cu \cdot L18$. Координационные числа определены в диапазоне 5-6 атомов, однако точность определения координационного числа для комплексов $Cu \cdot L17$ и $C \cdot L18$

оказалась крайне невелика. Результаты позволяют предложить структуру, из которой можно определить, с какими гетероатомами происходит координация тяжёлого металла, как искажается структура лиганда.

Разработанные подходы можно будет использовать при анализе краун-содержащих фотохромных систем.

Работа выполнялась совместно с ИНЭОС РАН в рамках гранта РНФ_ОИ №19-73-20187

Исследование нанокompозитов из железо-никелевого сплава с аморфной фазой фуллеренов

Целью работы было исследование взаимодействия компонентов в железо-никелевых металл-матричных композитах с аморфной фазой фуллеренов C_{60} (1.7 ат.%), синтезированных при высоких температурах и высоких давлениях: 2 ГПа, 950 °С; 4.5 ГПа, 900 °С и 8 ГПа, 800 °С.

Полученные образцы представляли собой таблетки диаметром 5 мм и толщиной около 3 мм. Методами нейтронной и рентгеновской дифракции, нейтронной и синхротронной томографии, просвечивающей электронной микроскопии, термического и микроструктурного анализа и измерения микротвёрдости исследовано взаимодействие металлического сплава с аморфной фазой фуллеренов C_{60} . При спекании получают композиты, в которых основная по объёму металлическая компонента сохраняет ГЦК кристаллическую решётку, в которой растворен углерод, и образуется карбид и отдельные структурные области, в которых содержатся мелкие участки спла-

ва и углеродная фаза (рис. 3.26). Микротвёрдость этих структурных областей вдвое больше, чем сплава. Возможными причинами упрочнения этих областей являются появление аморфного графита, образующегося из фуллерена, и измельчение частиц металлической фазы.

Проведённые исследования показали, что, в отличие от традиционных металл-матричных композитов, в композитах с фуллереновой связующей компонентой при их синтезе происходят сложные процессы взаимодействия составляющих, и исследование этих процессов даст возможность управлять структурой и свойствами этих композитов, что расширит области их применения в различных областях промышленности.

Работа велась в рамках гранта РФФИ №18-32-00262 мол_а

Результаты работы опубликованы в статье: *Borisova P.A. et al. Interaction between Fe–Ni Austenitic Alloy and Minor Amounts of Mechanically Milled C_{60} Fullerene at High Temperatures and Pressures / Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics – 2019. V. 83 № 10 P.1219.*

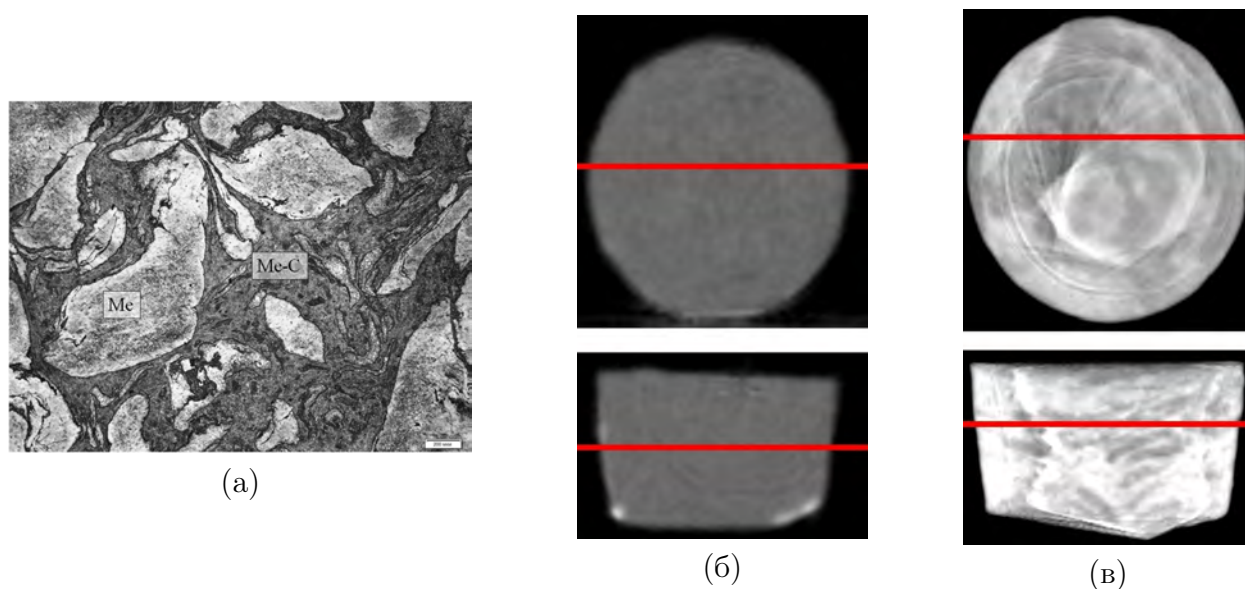


Рис. 3.26. Изображение микроструктуры поверхности композита, полученного при спекании аустенитного сплава Fe-Ni с аморфной фазы C_{60} , 1.7 ат %, при 8 ГПа и 800 °С. Масштабная метка в правом нижнем углу соответствует 200 мкм. Томографические срезы, полученные с использованием нейтронного (б) и синхротронного излучения (в). Красная линия верхнего изображения соответствует положению секущей плоскости для нижнего изображения и наоборот

Комплексное изучение древних пигментов и красок с привлечением рентгеновского излучения, электронной микроскопии и химико-аналитических методов

Для выполнения красочных рисунков на скалах древние художники использовали различные пигменты, представляющие собой как индивидуальные минералы, такие как красный гематит или жёлтый гётит, так и природные смеси минералов на их основе — охры.



Рис. 3.27. Наскальные изображения Каповой пещеры

Количество оттенков природных охр велико, однако люди иногда предпочитали

получать красный цвет за счёт обжига минералов, содержащих гётит. Уже начиная с температуры 220°C жёлтый гётит начинает превращаться в красный гематит. С увеличением температуры и продолжительности нагрева возрастает интенсивность цвета получаемого пигмента, чем, вероятно, и была привлекательна данная технология.

Анализ «карандашей» охры – гематит-содержащих кусочков со следами истирания или без них, позволил обнаружить в них признаки обжига при низкой температуре, когда только часть гётита превратилась в гематит. Однако высокая вариабельность состава природных охр не позволяет рассматривать данный фактор как единственную из возможных причин присутствия в образцах смеси гётита и гематита.

Работа велась в рамках гранта РФФИ №17-29-04172

Результаты работы опубликованы в статье: *Пахунов А.С. и др. Изучение писаницы на реке Джалинда в Сретенском районе Забайкальского края в 2019 году // Проблемы археологии, этнографии, антропологии Сибири и сопредельных территорий. Новосибирск: Изд-во ИАЭТ СО РАН, 2019. Т. XXV.*

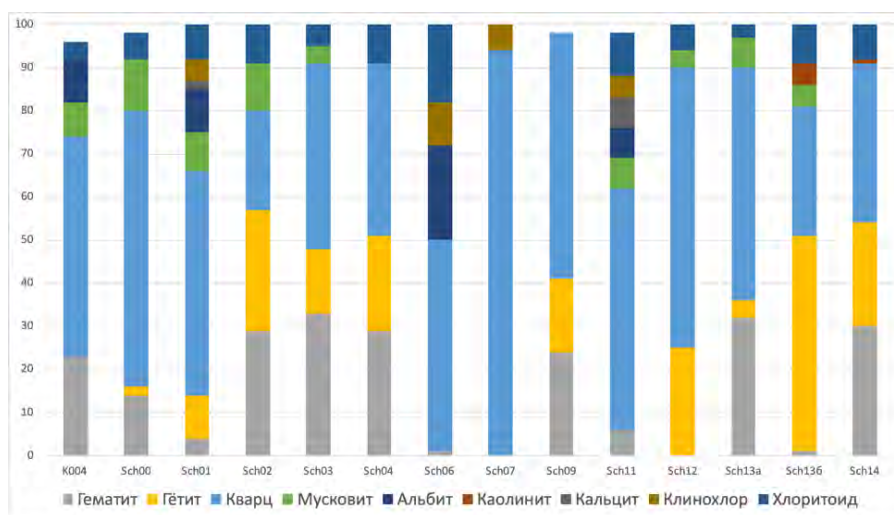


Рис. 3.28. Фазовый состав образцов по данным порошковой рентгеновской дифракции на СИ (ст. Рентгеноструктурный анализ)

Гранты, по которым велись работы в ККСНИ

Помимо выполнения государственного задания, часть работ в комплексе выполняется в рамках соглашений с Министерством науки и высшего образования, по грантам Российского научного фонда и Российского фонда фундаментальных исследований.

Традиционным для комплекса является соглашение с Минобрнауки России по теме «Развитие уникальной научной установки класса "мегасайенс" Курчатовский источник синхротронного излучения (УНУ КИСИ) с целью расширения экспериментальных возможностей и разработки аппаратно-методических подходов к проведению экспериментов на источниках синхротронного излучения нового поколения» (№ 05.619.21.0015.) Соглашение направлено на развитие уникальной научной установки и поддержку экспериментов.

Большой успех для комплекса — победа в конкурсе РНФ на проведение исследований на базе существующей инфраструктуры мирового уровня. Курчатовский источник синхротронного излучения оказался самым востребованным объектом инфраструктуры в стране - в фонд было подано 30 заявок на проведение экспериментов на синхротронном источнике. 10 проектов было поддержано фондом.

Таблица 3.1. Перечень проектов, поддержанных РНФ в 2019 г по мероприятию «Проведение исследований на базе существующей научной инфраструктуры мирового уровня», в которых объектом инфраструктуры для проведения исследований является УНУ КИСИ

№	Название проекта	Организация
19-72-20066	Физические закономерности образования локальных атомных конфигураций и их влияния на физико-химические и механические свойства аморфных и упорядочивающиеся металлических материалов под воздействием больших пластических деформаций: эксперименты с использованием методов EXAFS и EELFS спектроскопии	ЦНИИ Чермет им. И. П. Бардина, г. Москва
19-73-20035	Новые подходы к конструированию кристаллических материалов: супрамолекулярные клетки на основе металлокластеров каликсаренов	КФУ, г. Казань
19-73-20087	Соединения включения на основе пористых металл-органических каркасов: структура, реакционная способность и функциональные свойства	ИНХ им. А. В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск
19-73-20020	Молекулярный дизайн гетерогенных катализаторов для производства, хранения и транспортировки высокочистого водорода	ИК СО РАН, г. Новосибирск
19-73-20051	Актиниды в объектах ядерного наследия	МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва
19-72-20180	Совместимость и трансформация функциональных неорганических наночастиц с культурами клеток в формируемых in vitro гибридных материалах по данным синхротронных исследований реконструкции атомного и электронного строения	ВГУ, г. Воронеж
19-73-20236	Особенности строения, надмолекулярной организации и химических реакций самоорганизующихся карбосилановых и олиготиофенсилановых дендримеров в блочном состоянии и на межфазных границах раздела	МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва
19-73-20124	Наноразмерные каталитические системы на основе фосфодопированных углеродных материалов	ИОНХ РАН, г. Москва
19-73-20212	Создание новых методов синтеза ценных органических соединений с помощью селективного каталитического образования связей углерод-углерод и углерод-гетероатом	ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, г. Москва
19-73-20187	Управление взаимодействием лиганд – ДНК с использованием молекулярных фотопереключателей	ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, г. Москва

Глава 4

Разработка концепции синхротрона 4-го поколения с энергией 6 гэВ



Рис. 4.1. Общий вид синхротронно-лазерного комплекса СИЛА

Основу проекта составляет комбинация накопительного кольца и лазера на свободных электронах. Такая конфигурация позволяет сочетать достоинства обеих систем

и при этом минимизировать затраты на их создание и эксплуатацию за счёт использования единого инжекционного комплекса и общей инфраструктуры.

4.1. Ожидаемые параметры синхротрона СИЛА

Проектируемый ускоритель 4-го поколения должен обеспечить параметры, превосходящие характеристики существующих в настоящее время накопительных колец — в первую очередь, рекордный горизонтальный эмиттанс электронного пучка, а следовательно, и минимальный размер источ-

ника при высокой степени когерентности и яркости. Предполагается, что этого удастся достичь за счёт использования прогрессивной магнитной структуры – НМВА (Hybrid Multi Bend Achromat) и увеличения длины периметра накопителя.

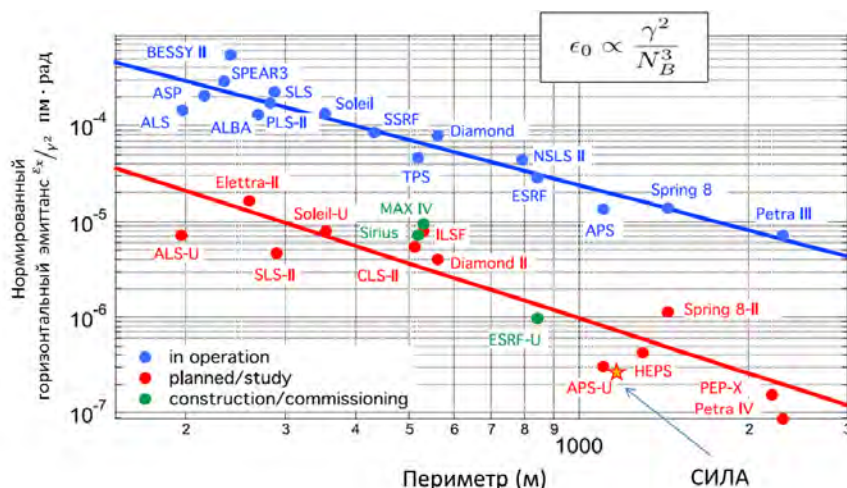


Рис. 4.2. Сравнение синхротрона СИЛА с зарубежными источниками

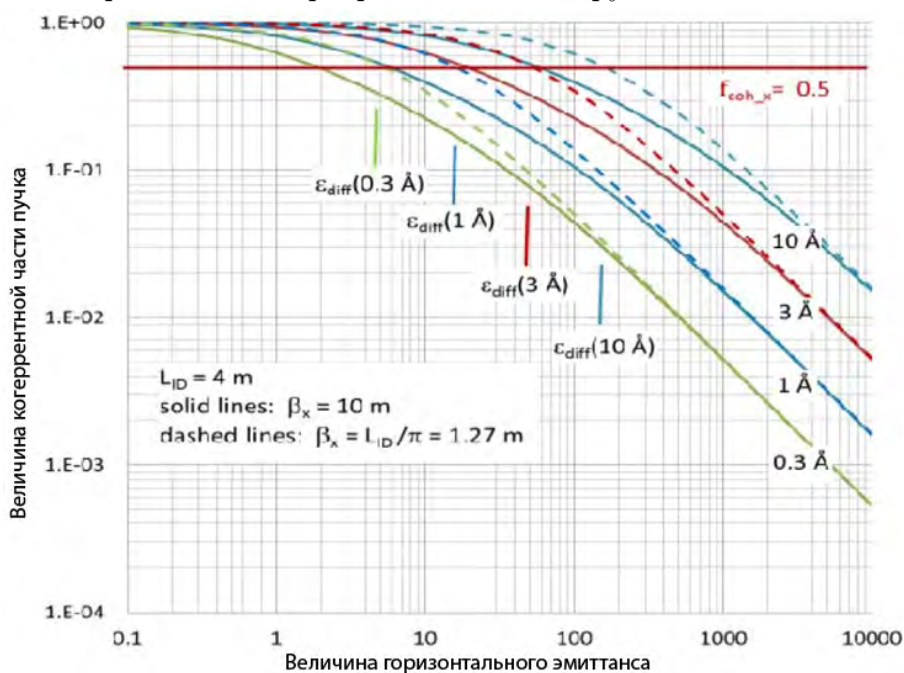


Рис. 4.3. Доля когерентного излучения для ускорителей с различным эмиттансом

Степень когерентности источников фотонов на базе накопительных колец напрямую зависит от эмиттанса электронного пучка. На Рис. 4.2 приводятся зависимости степени когерентности излучения из ондулятора от эмиттанса электронного пучка и

длины волны излучения, где пунктирными линиями обозначена степень когерентности при оптимальном поведении горизонтальной бета-функции в ондуляторе, а сплошной — при реальном. Так, для длины волны излучения 1 Å при эмиттансе пучка порядка

50 пм · рад степень когерентности составляет всего несколько процентов. При эмиттансе порядка 10 пм · рад степень когерентности достигает 50%, что как минимум на порядок больше достигаемых величин степени когерентности на современных источниках синхротронного излучения. Таким образом, уменьшение эмиттанса электронного пучка автоматически приводит к увеличению степени когерентности излучения.

В качестве базовой конфигурации магнитооптической системы накопительного синхротрона на энергию 6 ГэВ выбрана хорошо зарекомендовавшая себя структура с семью поворотными магнитами – 7ВА, в частности, предлагаемая к реализации в

проекте ESRF-EBS. Суперпериод магнитной структуры, кроме семи диполей, из которых четыре – диполи с переменным продольным градиентом, а три – с квадрупольной фокусировкой, содержит 16 квадруполей, 6 секступолей и 2 октуполя.

Значение рассчитанного равновесного горизонтального эмиттанса пучка для данного варианта накопителя составило $\varepsilon_x = 45$ пм · рад, длина сгустка — 3,4 мм (в приближении нулевого тока), потери энергии в поворотных магнитах (без учёта вставных устройств) на один оборот – 1,82 МэВ. Вертикальный эмиттанс должен составлять величину на порядок или два меньше, чем горизонтальный, т.е. $\varepsilon_y \sim 0.5 \div 4.5$ пм · рад.

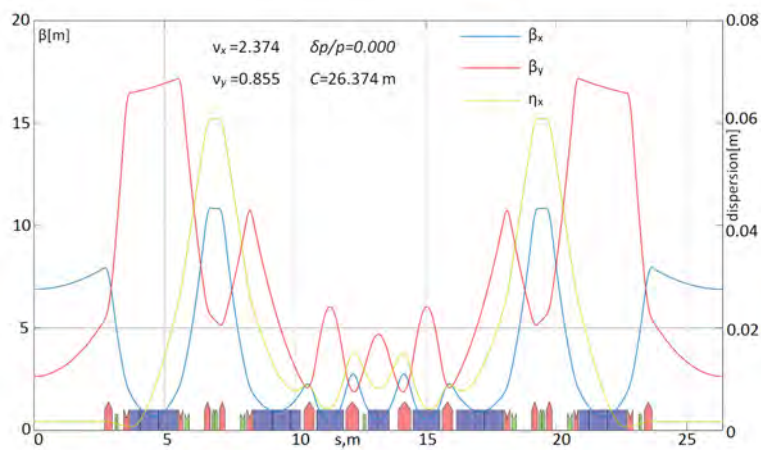


Рис. 4.4. Оптические функции накопителя с периметром 1213 м и магнитной структурой 7ВА.

Рассчитанные варианты накопителя представляются приемлемыми как по размерам, так и по полученным целевым параметрам. Однако дополнительные перспективы открываются при рассмотрении структуры 8ВА, точный расчёт которой должен стать предметом следующего этапа разработки комплекса СИЛА. Данная структура позволяет, кроме ондуляторов в прямолнейных промежутках, установить допол-

нительные излучатели в промежутках между двумя центральными диполями - трёхполюсные шифтеры или короткие поворотные магниты с большим полем, и за счёт этого получить источники жёсткого излучения с непрерывным спектром и малым поперечным размером. Источники такого типа востребованы как в задачах визуализации, так и для спектроскопии.

Оценки параметров фотонных источников

Для оценки параметров фотонных источников, которые могут быть установлены на данной машине, следует учитывать следующие факторы. Основной тип источников, запланированных для экспериментальных станций — ондуляторы на постоянных магнитах с периодами 27–45 мм. Также

на некоторых станциях могут потребоваться вакуумные ондуляторы с коротким периодом — порядка 14–18 мм, сильнополюсные виглеры и короткие поворотные магниты. Рассмотрение достижимых яркостей и потоков фотонов следует начинать с рассмотрения ондуляторных источников.

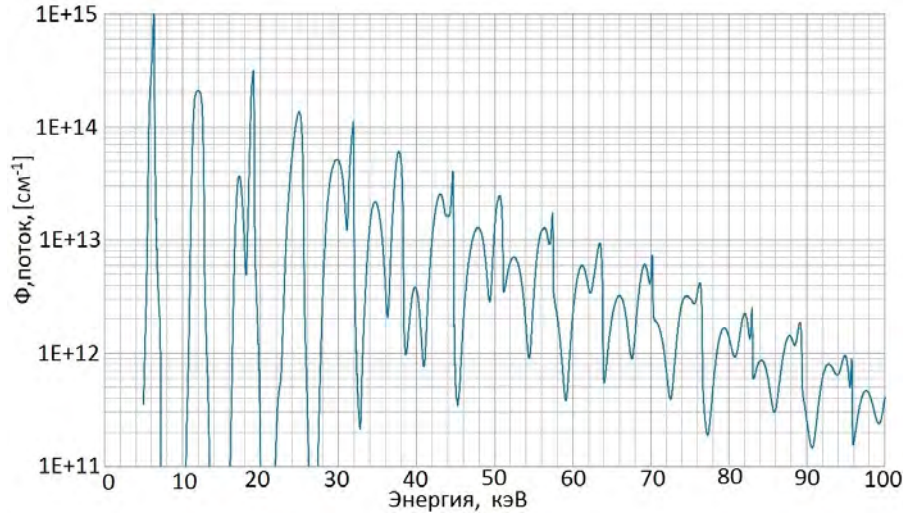


Рис. 4.5. Поток фотонов из ондулятора U27 через апертуру $2.5 \cdot 1$ мм на расстоянии 30 м от источника при его установке на синхротроне СИЛА

Размер источника и расходимость

Приведём расчёты размеров источника для вставных устройств. Размер источника (сгустка электронов) в ондуляторе: $\sigma_x = \sqrt{\varepsilon_x \beta_x}$ — корень из произведения эмиттанса на бета-функцию, расходимость $\sigma'_x = \sqrt{\varepsilon_x / \beta_x}$ — корень отношения эмиттанса к бета-функции. В представленной структуре (см. рис. 4.4) в прямолинейных промежутках $\beta_x = 6.8$ м, $\beta_y = 2.9$ м, эмиттанс накопительного кольца $\varepsilon_x = 45$ пм · рад, $\varepsilon_y = 0.45 \div 4.5$ пм · рад.

$$\sigma_x = 18 \text{ мкм}, \quad \sigma_y = 1.2 \div 3.5 \text{ мкм},$$

$$\sigma'_x = 2.5 \text{ мкрад}, \quad \sigma'_y = 0.4 \div 1.3 \text{ мкрад}.$$

Размер фотонного источника от одного электрона в ондуляторе для $\lambda = 1 \text{ \AA}$, онду-

лятора длиной 2 м:

$$\sigma_r = \frac{\sqrt{2\lambda L_u}}{2\pi} = 3 \text{ мкм},$$

$$\sigma'_r = \sqrt{\frac{\lambda}{2 \cdot L_u}} = 5 \text{ мкрад}.$$

Как можно видеть, эти величины близки, т.е. источник близок к дифракционно ограниченному. Результирующий размер источника получается свёрткой размеров одноэлектронного источника с разбросом электронного сгустка:

$$\sigma_{Tx} = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_r^2} \approx 18.3 \text{ мкм}, \quad \sigma_{Ty} \approx 4.5 \text{ мкм};$$

$$\sigma_{Tx'} = \sqrt{\sigma_{x'}^2 + \sigma_r^2} \approx 6 \text{ мкрад}, \quad \sigma_{Ty'} \approx 5 \text{ мкрад}.$$

Варианты ондуляторов

Каждая из команд, предложивших концепции экспериментальных станций, сделала оценку требуемого спектрального состава излучения, и предварительно выбрала варианты подходящих излучателей. Для ондуляторов с таким периодом, уже установ-

ленным на синхротронах ESRF и PETRA-III, были выполнены оценки яркости, мощности и плотности мощности генерируемого излучения в случае установки их на синхротроне СИЛА. Перечень выбранных вариантов приведён в таблице.

Таблица 4.1. Параметры возможных встраиваемых устройств (ID) синхротрона СИЛА

ID	Мод	λ_u [мм]	N_{per}	Длина [мм]	B_{max} [Т]	K_{max}	$\mathcal{E}_1$ [кэВ]	P_{tot} [кВт]	$P_{c.cone}$ [кВт/мрад ²]
U_14	српу	14.4	138	1987.2	1.000	1.345	12.471	9,06	388
U_18	српу	18	83	1494	0.999	1.680	7.880	6.80	233
U_21	рпу	21.3	108	2300	0.370	0.737	12.627	1.44	112
U_23	рпу	23.0	84	1932	0.61	1.3	8.059	3.22	143
U_27	рпу	27	59	1593	0.556	1.402	6.386	2.24	92
U_32	рпу	32	50	1600	0,645	1,929	3.737	3.04	91
U_35	рпу	35	46	1610	0,708	2,314	2.657	3.68	92
U_42	рпу	42	38	1596	0.834	3.274	1.281	5.07	89
U_65	ему	65.6	72	4716	1.03	6.3	0.3	22.8	208

Для приведённых в таблице параметров вставных устройств рассчитаем кривые спектральной яркости и потока в централь-

ном лепестке, а также полной мощности, генерируемой устройством, и плотности мощности на оси.

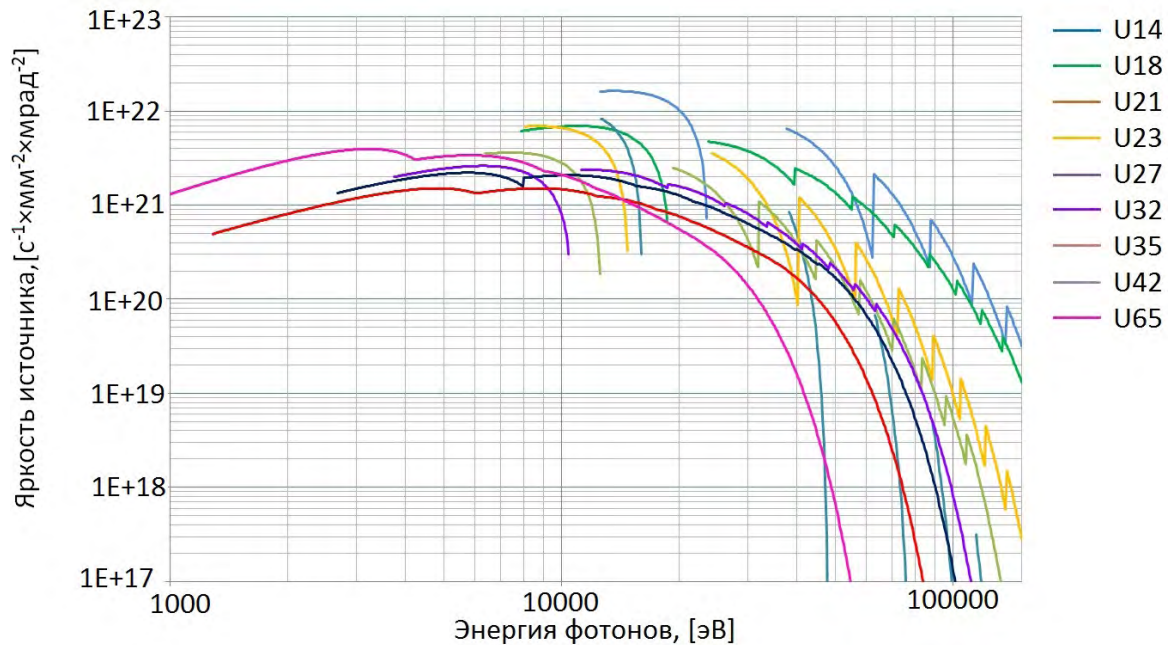


Рис. 4.6. Кривые спектральной яркости (огibaющая) приведённых встраиваемых устройств

Вигглеры и поворотные магниты

Так как в машинах со структурой НМБА для улучшения эмиттанса снижают поле в поворотных магнитах, использовать их в качестве источников рентгеновского излучения, в особенности жёсткого, становится затруднительно. Решением может быть установка специализированных коротких излучателей — одиночных сильнополевых магнитов, или малопериодных вигглеров — с 2–3 периодами. В середине периода ускорителя есть малый промежуток, хорошо подходящий для установки подобных устройств. Использование этого промежут-

ка позволяет оставить свободными длинные прямолинейные промежутки. При выборе типа и параметров устройств мы можем опираться на аналоги, предлагаемые для ESRF-EBS. Это одиночный магнит с полем, равным полю в поворотных магнитах старой структуры ESRF, а также двух- и трёхполюсные шифтеры на постоянных магнитах. Для станции мультимасштабной визуализации BM18 разработан трёхполюсный вигглер с предельным для постоянных магнитов полем - 1.56 Тл.

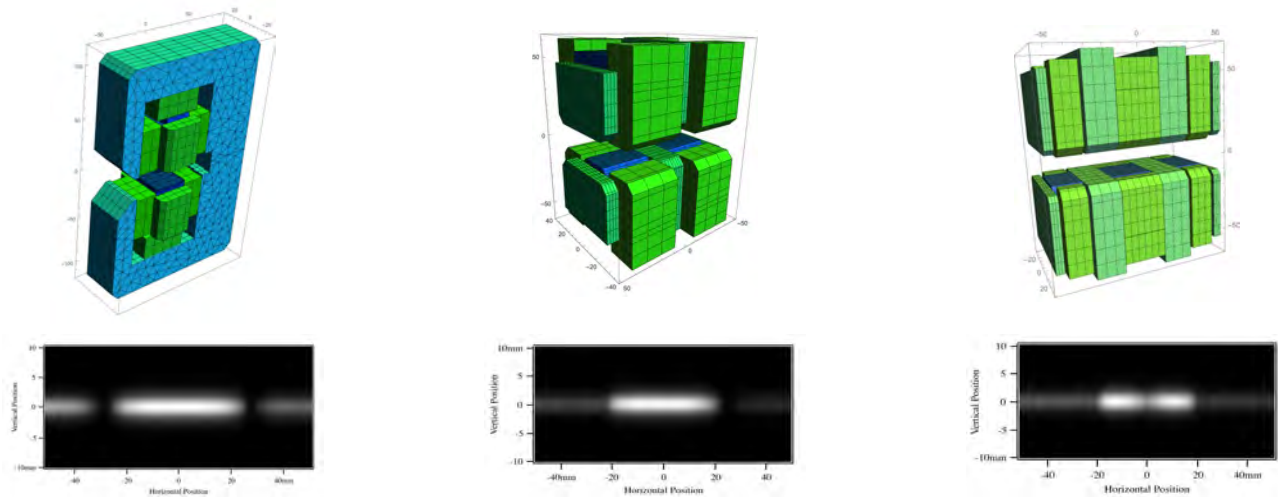


Рис. 4.7. Варианты коротких источников, запланированных в ESRF-EBS, а также пространственное распределение излучения из этих источников. По данным проекта ESRF-EBS

4.2. Концепт-проекты экспериментальных станций первой очереди синхротрона СИЛА

Таблица 4.2. Перечень станций первой очереди синхротрона СИЛА.

Название	Область знаний	Энергия фотонов, кэВ	Источник
Многомасштабная визуализация	Исследование внутреннего строения объектов размерами от 1 мкм до 1 м с разрешением 0.1 — 100 мкм	10—300	Ондулятор-револьвер + трёхполюсный SCW
Структурная кристаллография	Материаловедение, физика твёрдого тела, структурная химия, кристаллохимия, неорганическая химия, анализ функциональных материалов	5—80	CPMU23 + U35
Поверхность и интерфейс	Физика наносистем и нанотехнология, биотехнология и молекулярная биология, фармакология и адресная доставка лекарств, структура поверхности, морфология двумерных систем	7—40	U27 ∨ U35
Малоугловое рассеяние и рентгеновская фотон-корреляционная спектроскопия	Молекулярная биология, синтез и самоупорядочение наночастиц, мезоструктура, динамика в полимерных системах и «мягкой материи», атомная динамика в разупорядоченных системах и при фазообразовании, динамика магнитных доменов	5—25	U21 + U25
Фотоэлектронная спектроскопия в жёстком рентгеновском диапазоне	Физика твёрдого тела, физика наносистем, катализ, полупроводниковые технологии, сильно коррелированные системы, топологические изоляторы, двумерный электронный газ, in-situ и operando исследования	2—20	U33
Нанодифракция	Науки о материалах, физика наносистем, физика конденсированных сред, нанотехнологии и нанoeлектроника	5—40	U27 + U35
Когерентные приложения	Науки о материалах, физика наносистем, медицина, биология, химия, науки о Земле, культурное наследие	5—50	U27 + U35
Магнитное рассеяние	Физика магнитных явлений, физика наносистем, физика конденсированного состояния	2.5—27	APPLE II/ DELTA/ HELIOS
Фотоэлектронная спектроскопия в мягкой рентгеновской области	Полупроводниковые технологии, физика поверхности, физика наносистем, сильно коррелированные системы	0.1—2	UE125, различная поляризация
Спектроскопия поглощения рентгеновского излучения	Электронная и атомная структура материалов, физика, химия, биология, геология, медицина, науки об окружающей среде	5—30	U35 + U40
Серийная кристаллография	Макромолекулярная кристаллография; структурная биология; изучение динамики процессов, происходящих в молекулах белков; исследование кристаллов микроразмера методами серийной кристаллографии	5—20	U24 ∨ U35
Времяразрешающие методы	Исследование динамики переходных процессов и химических реакций, в том числе фотоиндуцированных, физики плазмы, ударных волн, нелинейных эффектов, движения и взаимодействия молекул и атомов	5—30	U27 + U35

Станция многомасштабной визуализации

Область знаний. Исследование внутреннего строения объектов в диапазоне разрешения 0.1 — 100 мкм и диапазоне размеров от 1 мкм до 1 м.

Концепция проекта. Станция нацелена на изучение внутреннего строения объектов с пространственным разрешением от долей до десятков микрон. Большой интерес представляет возможность визуализации небольших зон интереса с высоким (≈ 1 мкм) разрешением внутри крупных (≈ 1 м) объектов. Для реализации проекта необходим источник излучения, перестраиваемый в широком диапазоне энергий от десятков до сотен кэВ, необходимо варьировать поле зрения от нескольких микрон до 1 м. Для формирования пучка используются элементы рентгеновской оптики, а также детекторы высокого и сверхвысокого пространственного разрешения. Информация, получаемая на станции визуализации источника синхротронно-

го излучения 4 поколения, не может быть получена другими методами.

Практическая значимость. Научные задачи станции широко представлены практически во всех областях науки и технологий: биология и медицина, материаловедение, контроль узлов и механизмов, аддитивные технологии, культурное наследие, палеонтология и другие. Практические результаты включают в себя анатомические исследования тканей человека в норме и патологии, исследование новых материалов, в том числе в процессе их производства *in situ* и эксплуатации *in operando*, контроль изделий высокотехнологичных производств, исследование объектов культурного наследия. Результаты исследований потенциально интересны для промышленности: медицины и биотехнологий, микроэлектроники, машиностроения, металлургии и др.

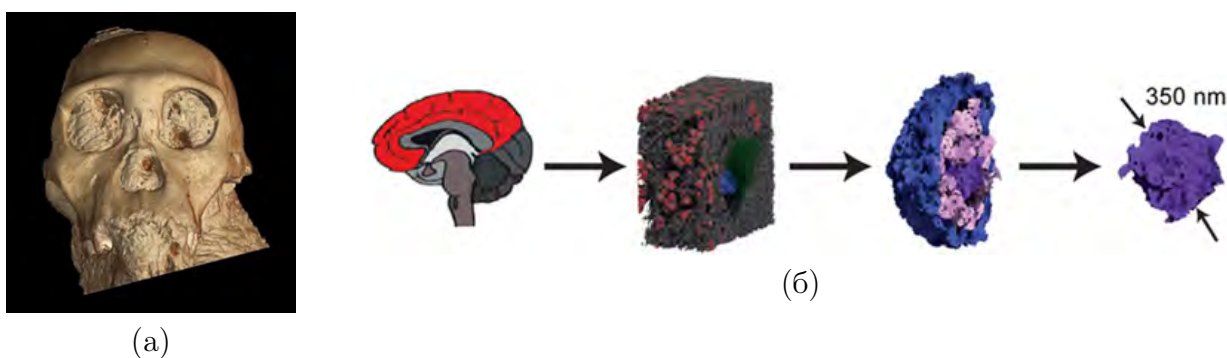


Рис. 4.8. Томография черепа ископаемого человека (а). Иерархическая визуализация мозга вплоть до нанометрового масштаба(б)

Мировой уровень. Станции визуализации микро- и макро- объектов являются крайне востребованными и широко используемыми научными установками на высокоэнергичных источниках синхротронного излучения. Основной тенденцией имеющихся станций следует признать узкие ограничения как на механизм контраста, так и на масштаб визуализации. Предлагаемый проект направлен на представление научно-

му и технологическому сообществу уникального инструмента визуализации внутренней структуры объекта в масштабе от единиц микрона до единиц метров с использованием фазоконтрастных механизмов формирования изображений. В настоящее время синхротронных инструментов визуализации, работающих в линейном масштабе до шести порядков, не существует.

Экспериментальные методы.

- Фазоконтрастная визуализация в большом диапазоне энергии — до и более 300 кэВ
- Микротомография
- Сверхбыстрая (~ 10 Гц) томография
- Ультрабыстрая ($\sim$ МГц) радиография
- Иерархическая томография
- Топография.

Параметры станции.

- Энергия: 10—300 кэВ
- $\Delta E/E$ от $\sim 10^{-5}$ до «розового» пучка
- Размер источника ≈ 5 мкм.

Источники:

- Ондулятор револьверного типа на диапазон энергий 20—250 кэВ
- Трёхполюсный сверхпроводящий вигглер для широкого поля зрения и высокой энергии > 300 кэВ.

Станция структурной кристаллографии

Область знаний. Материаловедение, физика твёрдого тела, структурная химия, кристаллохимия, неорганическая химия, анализ функциональных материалов.

Концепция проекта. За счёт использования нескольких методик станция будет способна решать большой комплекс задач в широком диапазоне научных интересов: определять структуры белковых и низкомолекулярных соединений (XRD); анализировать фазовый состав и внутреннюю структуру различных неорганических и металлоорганических соединений со сверхмалым количеством образца, включая функциональные материалы (сверхпроводники, материалы для водородной энергетики, новые магнитные материалы и др.), металлоорганические каркасы, катализаторы, объекты культурного наследия и многое другое (XRPD); изучать методами REXD и DAFS соединения, содержащих близкорасположенные в таблице Менделеева атомы; определять структуры материалов, не имеющих дальнего порядка трансляционной симметрии – стекла, квазикристаллы, наночастицы и нанокристаллы, неупорядоченные и сильно дефектные материалы, аперiodические материалы (PDF). Станция нацелена на проведение исследований методами порошковой и монокристалльной дифракции, в частности, с применением эффекта резонансного рассеяния. Измерения будут проводиться с использованием монохроматического излучения в широком диапазоне энергий. Оптическая схема станции должна обеспечивать возможность получения рентгеновского пучка с поперечными размерами от 10×10 мкм² до 1×1 мм². Предлагается использование быстрого двумерного детектора с возможностью изменения его углового положения в широком диапазоне углов рассеяния. Окружение образца будет позволять проводить измерения в широком диапазоне температур — от 4 до 1500 К, а также использовать различные газы в широком диапазоне давлений. Высокопоточность экспериментов будет обеспечиваться наличием роботизированной системы смены образца.

Практическая значимость. Появление современной станции структурной кристаллографии позволит существенно расширить диапазон исследуемых материалов и значительно повысить качество получаемых данных. Метод монокристалльной дифракции является основным экспериментальным методом для получения моделей трёхмерных атомных структур на сегодняшний момент. Определение трёхмерной атомной структуры веществ важно для анализа свойств материалов и понимания изучаемых физических эффектов, направленного синтеза новых соединений и контроля результатов химического синтеза. Возможность проводить измерения методом порошковой дифракции на сверхмалых образцах важна также при исследовании различных объектов культурного наследия, когда нет возможности получать большие объёмы исследуемых веществ. Получаемые на станции результаты будут востребованы во многих областях науки и промышленности, от структурной химии и биологии до экологии и археологии, от синтеза современных лекарств и катализаторов химических реакций до создания новых материалов для энергетики.

Результаты. За счёт использования порошковой дифракции высокого разрешения в комбинации со сверхвысокой яркостью и малой расходимостью падающего пучка становится возможным решать белковые структуры методом порошковой дифракции. В частности, на ESRF таким способом была решена структура кубического инсулина.

Мировой уровень. Экспериментальные станции порошковой и монокристалльной дифракции являются рутинным инструментом на всех источниках синхротронного излучения. Основной фокус таких станций – решение прикладных технологических задач на большом объёме разнородных объектов. Типичной практикой синхротронных центров является поддержание нескольких схожих по функционалу станций со специализацией на решении отдельных задач. Применение высокой яркости и ультравысокого

разрешения позволит создать универсальный и конкурентоспособный инструмент с обеспеченной востребованностью со стороны индустрии. Широкий фокус проводимых исследований от неорганических кристаллов и металлоорганических каркасов до белковых молекул обеспечит поддерж-

ку сразу нескольких направлений инновационного развития, от новых материалов и способов конструирования, ресурсосберегающей энергетики и источников хранения энергии до высокотехнологичного здравоохранения.

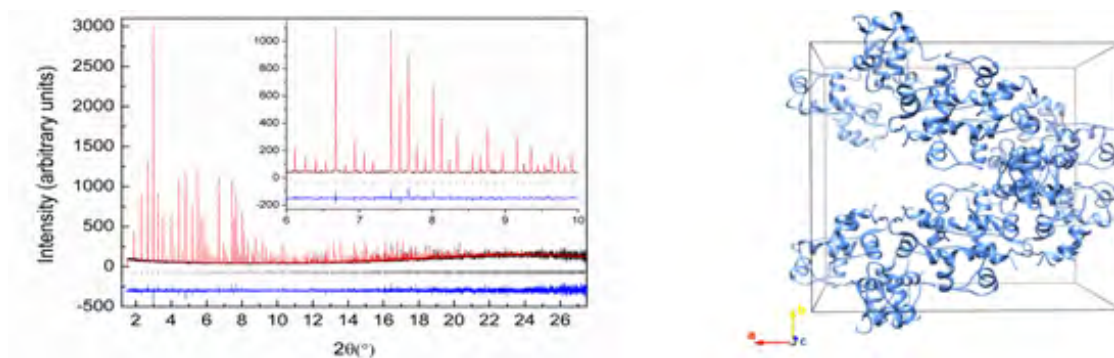


Рис. 4.9. Кубический инсулин. Пример белковой структуры, решённой методами порошковой дифракции. ESRF.

Экспериментальные методы.

- Монокристаллическая рентгеновская дифракция (XRD)
- Порошковая рентгеновская дифракция (XRPD)
- Резонансная дифракция (REXD)
- Тонкая структура аномальной дифракции (DAFS)
- Парная радиальная функция распределения (PDF).

Параметры станции.

- Источник излучения должен обеспечивать непрерывный энергетический диапазон 5—80 кэВ
- $\Delta E/E \sim 10^{-4}$.

Источники излучения.

- вакуумный ондулятор с периодом 23 мм
- обычный ондулятор с периодом 35 мм.

Станция исследования поверхности и интерфейсов

Область научных знаний. Физика наносистем и нанотехнология, биотехнология и молекулярная биология, фармакология и адресная доставка лекарств, структура поверхности, морфология двумерных систем.

Концепция проекта. Проект предложит широкое портфолио экспериментальных техник для исследования химических и физических процессов на твердых и жидких интерфейсах и наносистемах. Экспериментальная станция обеспечит уникальные возможности для *in situ* исследований на интерфейсах и поверхностях как единичных нано-объектов, так и их ансамблей, и откроет новые возможности для исследования динамики фундаментальных процессов в областях от материаловедения (катализ, электрохимия, 2D-материалы) до мягкой материи и биохимии (биоподобные системы, мембраны, полимеры, живые системы). Экспериментальная станция с высокой яркостью предназначена для проведения исследований на поверхности жидкости, границах раздела жидкость—твёрдое тело, жидкость—жидкость. Основной акцент экспериментальных методик будет сделан на поверхностно-чувствительные методы. За счет высокой яркости классические экспериментальные методы будут модифицированы для реализации экспериментов с временным разрешением. В арсенале экспериментальных методов появятся методы когерентной визуализации и рассеяния на поверхностных системах. Набор экспериментальных методов будет реализован в одном многофункциональном инструменте – жидкостном дифрактометре с неподвижным образцом. Для *in situ* исследований будут использованы специализированные ячейки образцов, такие как Ленгмюровская ванна, ячейки для формирования и исследования интерфейсов жидкость—твёрдое тело, жидкость—жидкость, а также ячейки для исследования поверхности расплавов.

Практическая значимость. Развитие современной биологии, биомедицины, фармакологии будет базироваться на знании механизмов биологических процессов в норме

и патологии с атомной точностью. Развитие методов диагностики живых систем является крайне важной задачей как с точки зрения фундаментальной, так прикладной науки и имеет первостепенное значение для современной фармакологии и биомедицины. Основным потребителем научных результатов станут научные центры и лаборатории при крупных фармакологических компаниях и биомедицинских центрах, в которых разрабатываются новые лекарственные субстанции и инновационные методы лечения. Результаты также будут интересны научным и производственным компаниям в области биоинженерии сельскохозяйственных растений и животных, а также при разработке новых нанобиоустройств, использующих принципы организации живой материи.

Мировой уровень. Экспериментальные станции для исследования межфазных границ (жидкость—пар, жидкость—твёрдое тело, жидкость—жидкость) создавались как единичные инструменты в разных синхротронных центрах и становились центром компетенций научных сообществ по коллоидной химии, биохимии, биомембранам и полимерам. К настоящему времени ведущие синхротронные центры (DESY, ESRF, Diamond) имеют по одной станции, а синхротроны APS и NSLS (США) и SSRF (Китай) реализуют проекты постройки трёх экспериментальных станций по исследованию межфазных границ. Предлагаемый проект экспериментальной станции основан на лучших и проверенных технических решениях, позволяющих реализовать экспериментальные методы на поверхности жидкости, что позволит ему сохранить конкурентоспособную позицию на фоне вновь создаваемых аналогичных инструментов. Использование научным сообществом такого инструмента позволит выявлять иерархические взаимосвязи между химией молекулярного уровня, эффектами самосборки, структурообразованием и функциональными свойствами новых материалов, что в конечном итоге, обеспечат лидирующие позиции сообщества в решении актуальных

задач наномедицины, молекулярной биологии, фармакологии и персонализированной медицине, а также продвижение в освоении природоподобных технологий.

Экспериментальные методы.

- Стоячие рентгеновские волны (XSW)
- Рентгеновская рефлектометрия (XRR)
- Дифракция скользящего падения (GID)
- Малоугловое рентгеновское рассеяние в скользящей геометрии (GISAXS, Coherent- GISAXS)
- Спектроскопия поглощения в скользящих углах (GI-XAS)
- Поверхностная нанодифракция (nSXRД)
- Фотон-корреляционная спектроскопия в скользящих углах (GI-XPCS).

Параметры станции:

- Энергия: 7-40 кэВ,
- $\Delta E/E \sim 1.4 \cdot 10^{-4} \div 2.7 \cdot 10^{-5}$;
- Поток монохроматизированного излучения на позиции образца на уровне $> 10^{13}$ ф/с
- Когерентность на уровне не хуже 5-20%;
- Оптика станции на базе рефракционной фокусирующей оптики, кристаллического монохроматора, зеркал и двухкристального дефлектора. Возможность непрерывной перестройки по энергии для спектроскопических экспериментов
- Размер фокуса $(25 \div 150) \times (15 \div 50)$ мкм (H×V).

Источники излучения.

- Обычный ондулятор с периодом 27—35 мм, линейная поляризация.

Станция малоуглового рассеяния и рентгеновской фотон-корреляционной спектроскопии

Область знаний. Молекулярная биология, синтез и самоупорядочение наночастиц, мезоструктура, гетерогенные катализаторы *in situ* и *in operando*, полимеры и композиты, динамика в полимерных системах и «мягкой материи», атомная динамика в разупорядоченных системах и при фазообразовании, динамика магнитных доменов.

Концепция проекта. Станция предназначена для изучения структуры и динамики неупорядоченных и слабоупорядоченных объектов. Структура неупорядоченных объектов определяется через форму рассеивающих объектов, распределение объектов по размерам. Большой поток СИ позволяет исследовать структуру в процессе изменения (химические процессы, самосборка) и в нестандартных условиях (каталитический реактор, высокие температуры). Использование когерентности СИ позволяет исследовать динамические процессы за счёт определения корреляционных функций.

Практическая значимость. Методы малоуглового рассеяния могут широко применяться для получения информации о форме и строении огромного числа материалов: белковых и биоорганических молекул, поверхностно-активных веществ, различных дисперсных систем (например, пигментов в краске, клеток крови), эмульсий, волокон, катализаторов, полимеров и нанокompозитов, жидких кристаллов, гелей и мембран. Использование информации о форме белковых молекул и структуре мембран позволит осуществлять направленный дизайн новых лекарственных средств. С использованием фотон-корреляционной спектроскопии станет возможным проведение исследований броуновского движения металлических наночастиц и мицелл сополи-

меров в растворах, конформационной динамики полимеров при стекловании, динамики дисперсных систем, процессов старения материалов и отсроченном осаждении частиц в различных коллоидных системах. Информация о структуре и динамической эволюции эмульсий, суспензий и других дисперсных систем будет актуальна при разработке и производстве новой лакокрасочной продукции с улучшенными потребительскими свойствами: долговечностью, хорошей адгезией, устойчивостью к внешним воздействиям. Знания о структуре и динамике полимеров и нанокompозитов будут востребованы при создании конструкционных материалов нового поколения для автомобильной промышленности, строительства, авиастроения, кабельной и упаковочной промышленности, используемых для защиты магистральных трубопроводов.

Мировой уровень. Станции малоуглового рассеяния рутинно используются научным сообществом на всех источниках синхротронного излучения. Принципиальным различием является достигаемое разрешение и возможность проведения экспериментов в динамике. Наиболее выдающимися параметрами в настоящее время обладает станция ID02 – ESRF, за счёт увеличенной базы и высокой яркости. Предлагаемый проект позволяет достичь схожих характеристик по разрешению и яркости, что в ближайшие 10 лет будет эталонным показателем для станций ультрамалоуглового рассеяния. Результаты полученные на станции окажут значительное влияние на развитие медицинских исследований, технологиям здравоохранения, биофизики и структурной биологии.

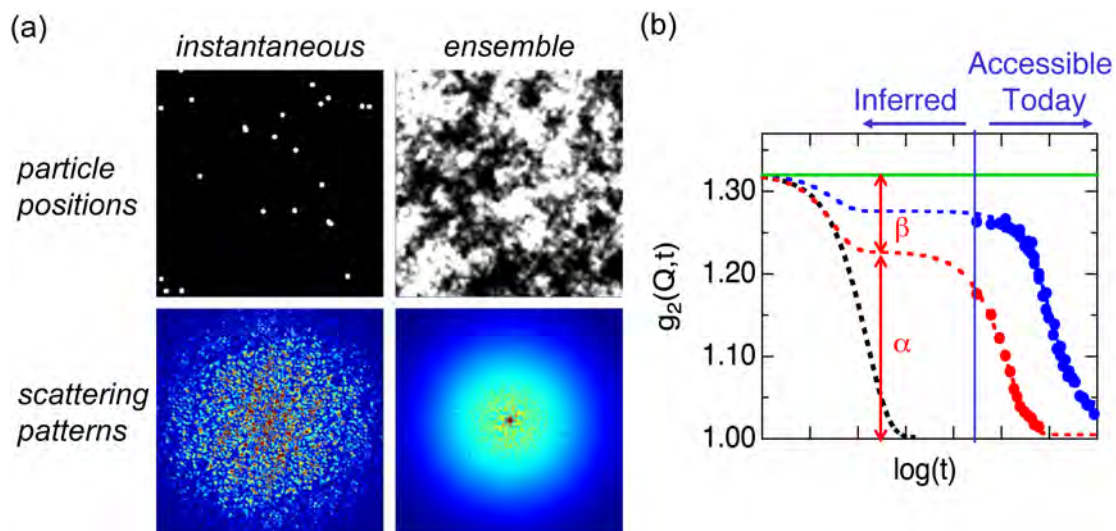


Рис. 4.10. Сравнение малоуглового рассеяния и фотон-корреляционной спектроскопии. [Early Science at the Upgraded Advanced Photon Source-2015]

Экспериментальные методы.

- Малоугловое рентгеновское рассеяние (SAXS)
- Аномальное малоугловое рассеяние (ASAXS)
- Рентгеновская фотон-корреляционная спектроскопия (XPCS)

Параметры станции.

- Энергетический диапазон: 5-25 кэВ
- $\Delta E/E \sim 10^{-2} \div 10^{-4}$.
- Горизонтально отклоняющий монохроматор для обеспечения временной стабильности
- Опция «розового пучка» с использованием естественной ширины линии ондулятора;

- Размер фокуса на образце - до 10 мкм и менее
- Детектор с большим приемным окном (SAXS)
- Высокоскоростной детектор со скоростью счета до 1 МГц (XPCS).

Источники излучения.

- Вакуумный ондулятор с периодом 21 мм
- Обычный ондулятор с периодом 25 мм.

Станция фотоэлектронной спектроскопии в жёстком рентгеновском диапазоне (HAXPES)

Область знаний. Физика твёрдого тела, физика наносистем, катализ, полупроводниковые технологии, сильно коррелированные системы, топологические изоляторы, двумерный электронный газ, *in situ* и *in operando* исследования.

Концепция проекта. Станция предназначена для исследования атомной и электронной структуры поверхностей, интерфейсов, наносистем и объёмных материалов с использованием фотоэлектронной спектроскопии в жёстком рентгеновском диапазоне в условиях приближенных к реальным (*in situ*, *in operando*). На станции будут решаться фундаментальные и прикладные задачи и получения новых знаний об атомной и электронной структуре приповерхностных слоёв и интерфейсов. Эти знания востребованы в различных областях науки и техники, таких как каталитическая химия, материаловедение эпитаксиальных тонких плёнок, наука об интерфейсах, физике полупроводников, технологии изготовления мемристоров, топологических изоляторов и пр. HAXPES является мощным инструментом для изучения химических свойств и электронной структуры объёма образца, глубоких интерфейсов сложных систем. Кроме того, большая энергия получаемых электронов позволяет получать спектры образцов без обязательного использования вакуумных условий, без ионного травления образцов или другой обработки поверхности.

Практическая значимость. Станция HAXPES станет необходимым инструментом для исследований в области высококоррелированных электронных систем и материалов спинтроники с поверхностями и интерфейсами. Научные результаты станции будут востребованы в областях наукоёмкой промышленности, где необходимо знание об электронной структуре, химическом и элементном составе исследуемых образ-

цов. В области микроэлектроники HAXPES позволяет прояснить состав и электронную структуру новых перспективных материалов, исследовать параметры полупроводниковых приборов, в том числе и в процессе работы — получить зонную структуру электронов с ее связь с пространственным распределением химических элементов на поверхности и в углублённых слоях и интерфейсах. В области физики катализаторов изучить особенности функционирования катализаторов и свойства процессов, происходящих при их использования, в области физики сверхпроводимости изучить электронную структуру сверхпроводящих областей и изменения в ней при внешних воздействиях и в процессе работы прибора, для гетерограниц, в том числе границ жидкость—твёрдое тело HAXPES позволяет изучить их поведение в том числе и при внешних воздействиях.

Мировой уровень. Станции фотоэлектронной спектроскопии с высокой кинетической энергией являются единичными инструментами в ведущих синхротронных центрах. Предлагаемый проект экспериментальной станции базируется на типичном дизайне инструментов подобного класса, что обеспечит его конкурентоспособность.

Экспериментальные методы.

- Фотоэлектронная спектроскопия (XPS)
- Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES)
- Фотоэлектронная спектроскопия в жестком рентгеновском диапазоне (HAXPES)
- Фотоэлектронная спектроскопия при давлениях близких к атмосферному (NAP-XPS)
- Спектроскопия рентгеновского поглощения (XAS).

Параметры станции.

- Энергетический диапазон 2-20 кэВ
- $\Delta E/E \sim 5 \cdot 10^{-5}$
- Оптика на базе эллиптических зеркал, двухкристального Si-монокроматора и спектрального фильтра
- Размер фокального пятна $\sim 10 \times 10$ мкм
- Сканирование электронной структуры

по глубине образцов при варьировании энергии фотонов – HAXPES

- Проведение *in situ* и *in operando* исследований образцов в условиях, приближенных к реальным (давление ~ 10 мбар, $T \sim 900$ K) - NAP-XPS.

Источники излучения.

- Ондюляторы с периодом 33 мм.

Станция нанодифракции

Область знаний. науки о материалах, физика наносистем, физика конденсированных сред, нанотехнологии и нанoeлектроника.

Концепция проекта. Станция нацелена на проведение структурных исследований различных материалов и наноразмерных объектов, наночастиц и микрокристаллитов, выявление отдельных дефектов и структурных образований, микронапряжений и микродеформаций с временным разрешением до долей микросекунд. Для решения поставленных задач требуется пучок СИ с высокой яркостью и степенью когерентности. Энергетический диапазон работы станции от 5 до 40 кэВ, что является оптимальным для указанных исследований. Работа в перестраиваемом диапазоне энергий позволит подбирать резонансные условия эксперимента. К основным научным направлениям относятся: 1) структурная диагностика компонент полупроводниковой микро- и нанoeлектроники; 2) разработка технологий получения новых материалов и структур, создание устройств на их основе.

Практическая значимость. Научные задачи станции широко представлены в областях материаловедения, микро- и нанoeлектроники, рентгеновской оптики и др. Получение новых знаний о материалах на наноуровне позволит вносить коррективы в технологический процесс формирования наносистем и управлять их физическими, оптическими и химическими свойствами. Осуществлять систематический контроль структурного качества и морфологии функциональных элементов, в том числе микроэлектронных устройств, металлоорганических солнечных элементов, электродов батарей, сверхпроводниковых устройств и т.д. Разработка новых материалов с заданными параметрами (в том числе композитных материалов и органо-неорганических, гибридных систем) является базовой платформой для создания как принципиально новых приборов, так и устройств с характеристиками, значительно превосходящими су-

ществующие. Результаты исследований потенциально интересны для промышленности: микроэлектроники, приборостроения, металлургии и машиностроения, энергетики, космических технологий и др.

Примеры исследований. С использованием метода когерентной брэгговской дифракции можно восстановить трёхмерную структуру нанопроволок InGaN/GaN, достоинством которых является возможность настройки спектра излучения путем регулировки состава слоя. Геометрия таких нанопроволок оказывает существенное влияние, как на выход фотолюминесценции, так и на эффективность ее регистрации. Указанные структуры применяются в различных областях – детекторы, фотодиоды и другие.

Анализ напряжённых структур находит широкое применение при разработке различных сплавов и конструкционных материалов. Разрушению материалов при пластических деформациях, как правило, предшествует появление так называемых полос сдвига. Воздействие внешней деформации на ориентацию и кристаллическую структуру микрозёрен в материале приводит к высокому градиенту напряжений вблизи полос сдвига на субмикронном уровне. Трёхмерная реконструкция напряжений в структуре с использованием нанодифракции позволяет выявить механизм ускоренного старения и разрушения конструкционных материалов.

Мировой уровень: Дифракционные станции с возможностью локального анализа получили широкое распространение во всех ведущих научных центрах (DESY P10, ESRF ID01). В больших синхротронных центрах (APS, SPRING, ESRF) функционируют несколько дифракционных станций общего назначения для решения рутинных индустриальных задач, а также реализован минимум один флагманский проект дифракционной станции с рекордными параметрами по локальности и разрешению. Предлагаемый проект экспериментальной станции по параметрам будет превосходить существующие сейчас аналоги и будет со-

хранять конкурентоспособность с другими вновь создаваемыми инструментами на источниках четвёртого поколения. Экспериментальная станция будет мощным источником научно-технических результатов ис-

пользуемых для создания приборов и изделий инновационных цифровых технологий, новых конструкционных материалов, новых функциональных элементов электроники.

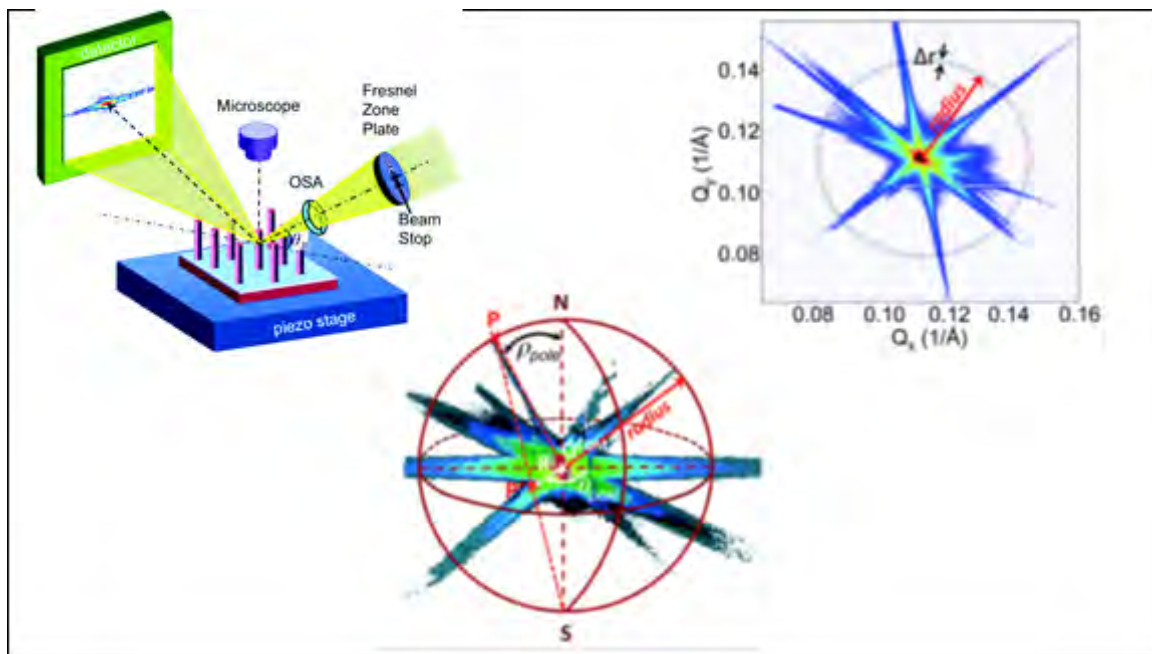


Рис. 4.11. Брэгговская когерентная дифракция от нанопроволок InGaN/GaN.

Экспериментальные методы.

- Нанодифракция (напо-XRD)
- Брэгговская когерентная визуализация (Bragg-CDI)
- Птайхография (Ptyhography)
- Рентгеновское картирование по поверхности (nanoXRD-mapping)
- *In situ* и *in operando* исследования.

Параметры станции.

- Энергетический диапазон 5–40 кэВ
- $\Delta E/E \sim 10^{-4} - 5 \cdot 10^{-5}$
- Двухкристальный монохроматор,
- Рефракционные первичные фокусирующие элементы, вторичная фокусировка на основе рефракционных линз и рентгеновских зеркал

- Размер фокального пятна на образце — 50 нм и меньше
- Многокружный гониометр образца с системой наноперемещений
- Двумерный детектор с высокой скоростью счета
- Ячейки для проведения *in situ* и *in operando* исследований.

Источники излучения.

- Ондулятор с периодом 27 мм
- Ондулятор с периодом 35 мм.

Станция когерентных приложений

Область знаний Науки о материалах, физика наносистем, медицина, биология, химия, науки о Земле, культурное наследие.

Задачи проекта. Получение распределения электронной плотности в исследуемом объекте на основе аналитического решения фазовой задачи взаимодействия когерентного излучения с веществом (CDI, PX, PXCT). Получение распределения химических элементов в микро- и нанометровом диапазоне (XRF, STXM). Получение распределения электрофизических характеристик в микро- и нанометровом диапазоне по образцу (XBIC, XBIV).

Концепция проекта. Станция нацелена на проведение локальных исследований различных материалов и наносистем, в том числе аморфных и неупорядоченных структур. Целевыми объектами являются стёкла, полимеры, дефекты в кристаллах, квантовые точки и нити, деформированные структуры и некоторые неорганиче-

ские наноструктуры, биологические целые клетки, органеллы, некоторые вирусы и молекулы белков. Будут использоваться методики 3D-визуализации объекта с высоким пространственным разрешением, распределения химических компонент, полей деформаций в кристаллических образцах, магнитных структур на микро- и наномасштабном уровнях. Предусмотрено проведение измерений в широком диапазоне температур и с временным разрешением.

Результаты. Когерентные методы CDI, PX, PXCT, XRF находят широкое применение в биомедицине, поскольку позволяют исследовать структуру биологических объектов на молекулярном уровне и отслеживать ее изменение во времени. Данные исследования могут быть полезны при создании лекарств или при изучении биологических процессов на микроуровне. В качестве примера представлена PXCT реконструкция дентина.

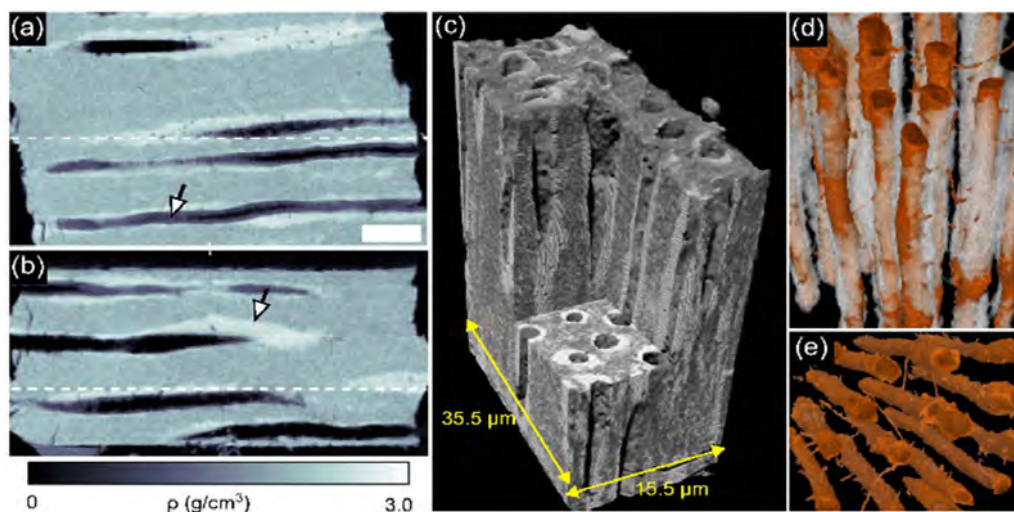


Рис. 4.12. Трёхмерная объемная визуализация (PXCT) дентина: (a) и (b) ортогональные изображения в объёме PXCT. Пунктиром показана линия их пересечения. Эти срезы являются ортогональными тому, который показан на (b). Стрелка в (a) указывает на органический мусор, а стрелка в (b) указывает на РТД. Цветная полоса, связанная с этими изображениями, показана под (b). (c)-(e) показывают 3D-рендеринг того же объёма. В частности, (d) и (e) выделяют архитектуру дентинных канальцев (диаметром от 1 до 2 мкм) и их ветвей (диаметр ~200 нм)

Мировой уровень. За последние 15 лет использование когерентных эффектов в рентгеновской оптике претерпело экспоненциальный рост, что послужило толчком для развития инструментальной базы принципиально новых экспериментальных станций, строительства лазеров на свободных электронах, а также запустило множество программ апгрейда синхротронных источников до 4-го поколения. На каждом синхротронном источнике 3-го поколения были созданы профильные станции для реализации когерентных экспериментальных методов. При этом на действующих сейчас источниках синхротронного излучения поток когерентных фотонов лежит в пределах от 0.1 до 1%. На когерентной станции источника ИССИ-4 доля когерентного потока будет более чем на порядок превышать существующие сейчас показатели. Результаты, получаемые при помощи когерентных методов, станут основанием для развития интеллектуальных производственных технологий конструкционных и функциональных материалов, технологий производства и хранения энергии, информационных и цифровых технологий.

Экспериментальные методы.

- Когерентная дифракционная визуализация (CDI)
- Рентгеновская птайхография (PX)
- Рентгеновская птайхографическая

компьютерная томография (РХСТ)

- Рентгеновская голография
- Рентгеновская сканирующая просвечивающая микроскопия (STXM)
- Рентгеновская флуоресценция в микро- и нанометровом диапазонах (μ -XRF, nanoXRF)
- Измерение индуцированного рентгеновским излучением тока и напряжения в образце (XBIC, XBIV)

Параметры станции.

- Энергетический диапазон 5—50 кэВ
- $\Delta E/E \sim 5 \cdot 10^{-5}$
- Двухкристальный монохроматор, с двумя парами кристаллов Si(111)/Si(311)
- Горизонтальные зеркала
- 1D & 2D Be трансфокатор для микронных пучков
- КБ-фокусировка и зонные пластинки для нанопучков
- Виброзащита оптики - относительный сдвиг между компонентами оптики не более 2 нм
- База станции (расстояние от ондулятора до поглотителя beamstop) не менее 120 м
- Многокружный гониометр образца с системой наноперемещений
- Размер фокального пятна на образце — от 5 нм до 100 мкм
- Ондулятор с периодом 27 мм
- Ондулятор с периодом 35 мм.

Станция для исследований магнитооптических эффектов

Область знаний. Наука о материалах, физика наносистем, физика конденсированного состояния, физика магнитных явлений, кристаллография

Концепция проекта. Экспериментальная станция позволит исследовать фундаментальные характеристики магнитных материалов, такие как величина, направление и распределение по глубине магнитного момента, величина коэрцитивной силы, внешние условия для фазовых магнитных переходов, определение расположения магнитных доменных стенок, определение знака взаимодействия Дзялошинского-Мории, определение абсолютной хиральности, использовать эффект магнитного дихроизма для фазоконтрастных методов, позволит получить необходимую информацию для разработки новых элементов спинтроники и магнетоэлектроники. Станция нацелена на проведение исследований магнитооптических эффектов в жёстком рентгеновском диапазоне длин волн с использованием эффектов магнитного кругового и линейного дихроизма в геометрии отражения и прохождения, а счёт элементной и орбитальной чувствительности рентгеновской спектроскопии будет разделяться спиновый и орбитальный вклады в магнетизм материала. Оптика на базе двухкристального монохроматора и фокусирующих зеркал и микрофокусирующих линз. Размер фокального пятна 1–40 мкм. Станция должна быть оснащена дифрактометром с большим числом степеней свобод, сверхпроводящими магнитами и электромагнитами с полем 0.001–15 Тл и системой циркуляции жидкого гелия. Предлагается использование анализаторов поляризации отражённого пучка.

Практическая значимость. Станция обеспечит научно-технологическую платформу для создания технологий, обеспечивающих переход на новые принципы функционирования элементов хранения информации, более энергоэффективные и быстрые способы записи информации и новых принципов функционирования элементов электроники. Станция позволит получить уни-

кальную информацию, невоспроизводимую лабораторными приборами для разработки твердотельных аккумуляторов без химической реакций, магниторезистивной энерго-независимой твердотельной памяти, состоящей из двух ферромагнитных слоёв разделяемых диэлектриком, которая по своим характеристикам таким как скорость записи и надёжность хранения информации превосходит флэш-память типа DRAM, спиновых полевых транзисторов обладающие меньшим энергопотреблением чем классические полевые транзисторы, новых элементов жёстких дисков работающих на принципе перезаписывания цилиндрических магнитных доменов, сверхпроводников применяемых для создания магнитных полей до 17 Тесла.

Результаты. Примером применения подобных техник стала работа в которой измерялась магнитная резонансная дифракция с поворотом поляризации для сверхпроводящего соединения $CePt_2In_7$ (рис. 4.13). В результате удалось определить распределение магнитного момента в узлах элементарной ячейки данного элемента, что позволило описать природу возникновения сверхпроводимости в кристаллах $CePt_2In_7$.

Мировой уровень. Каждая станция по исследованию магнитооптических эффектов представляют собой сложный объект экспериментальной инфраструктуры, что делает их единичными инструментами в передовых синхротронных центрах. Предлагаемый проект экспериментальной станции базируется на прогрессивных технологиях и по своим параметрам не будет уступать наиболее успешной в реализации станции ID12 на ESRF. Арсенал экспериментальных методов позволит проводить исследования магнитных материалов, элементов спинтроники и сверхпроводников, что обеспечит поддержку передовых цифровых технологий, технологий хранения и обработки больших объемов данных, а также технологии транспортировки энергии.

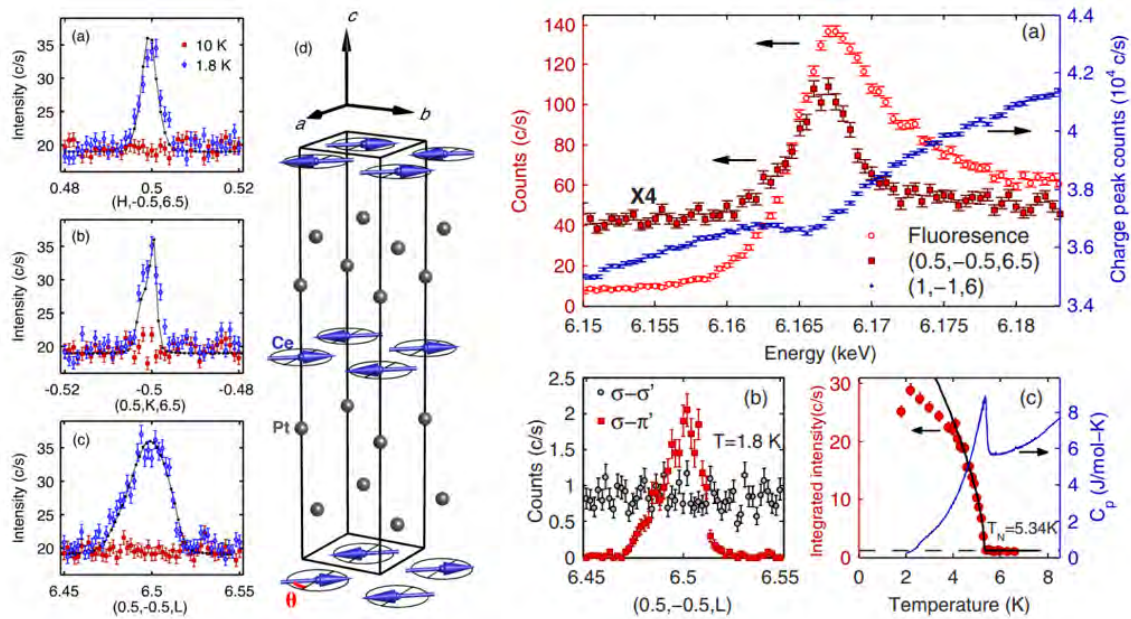


Рис. 4.13. Распределение магнитного момента в элементарной ячейке соединения $CePt_2In_7$. Кривая дифракционного отражения с поворотом поляризации полученная вблизи L_2 края поглощения Ce . [N. Gauthier, D. Werneille, N. Casati et al Phys. Rev B 96 064414 (2017)]

Экспериментальные методы.

- Рентгеновский магнитный круговой дихроизм (XMCD)
- Рентгеновский магнитный линейный дихроизм (XMLD)
- Рентгеновский естественный круговой дихроизм (XNCD)
- Рентгеновское резонансное магнитное рассеяние (XRMS).

Параметры станции:

- Энергетический диапазон 2.5–27 кэВ
- $\Delta E/E \sim 5 \cdot 10^{-5}$.

Источники излучения.

- набор эллиптических ондуляторов типа APPLE II/DELTA/HELIOS с варьируемой быстро переключаемой поляризацией.

Станция спектроскопии поглощения рентгеновского излучения

Область знаний. Электронная и атомная структура материалов, физика, химия, биология, геология, медицина, науки об окружающей среде.

Концепция проекта. Станция нацелена на изучение электронной и атомной структуры различных материалов, определение структуры электронных уровней атома с высоким энергетическим разрешением. К научным задачам относятся исследование атомной структуры веществ и зарядовых состояний атомов в материалах, имеющих фундаментальное научное и практическое значения (функциональных материалах). Наиболее сильно возможности станции востребованы в химии. Метод спектроскопии поглощения не предполагает наличия кристаллической структуры образца для определения его атомной структуры и позволяет исследовать процесс протекания химических реакций для понимания их механизмов, в том числе, при изучении катализа. Особое внимание будет уделено созданию специальных условий на образце: температура, газовая среда, что значительно расширяет возможности исследования процессов протекания химических, каталитических реакций. Высокая яркость излучения даст возможность проводить исследования образцов с низкими концентрациями целевых элементов и использовать кристаллы-анализаторы флуоресцентного излучения для увеличения энергетического разрешения метода.

Практическая значимость. Научные задачи станции широко представлены в областях биологии, химии, геологии и наук об окружающей среде и могут быть востребованы в химической промышленности, фармацевтике, медицине, при добыче полезных ископаемых и других областях. Исследования могут быть полезны при разработке лекарств, катализаторов, химических средств. Для задач экологии очень важна чувствительность к низким концентрациям, т.к. многие загрязняющие элементы находятся в низких, до единиц ppm концентрациях. Определение форм вхождения критически важных для промышленности хими-

ческих элементов на разных этапах обработки руды позволит повысить эффективность извлечения полезных ископаемых. На станции спектроскопии поглощения рентгеновского излучения будут проводиться исследования по следующим практически значимым направлениям:

1. *In situ* и *in operando* исследование процессов протекания химических реакций, для задач катализа и переработки углеводородов
2. Исследование микропримесей редких элементов в матрицах природных минералов, определение механизмов взаимосвязанного нахождения примесей
3. Определение и уточнение геометрии функциональных металлоцентров белков, например, гем в гемоглобине
4. Определение зарядового состояния и форм нахождения химических элементов - от переходных 3d-металлов до актинидов, загрязняющих окружающую среду.

Примеры исследований. Спектроскопия поглощения с высоким разрешением используется для определения координации атомов ртути с аминокислотами. Изучалось воздействие тяжёлых металлов на организм по степени их влияния на структуру биологических молекул, как они влияют и к каким мутациям в организме могут приводить. Показаны спектры сульфида ртути в α - и β -фазах. Из сопоставления спектров $Hg(cys)_4$ и $\beta - HgS$, измеренных традиционными методами, невозможно различить координацию атома ртути в биологической материи и в неорганическом соединении $\beta - HgS$, а на спектрах высокого разрешения видны явные различия (рис. 4.14).

Мировой уровень. Широкое распространение спектроскопических экспериментальных станций началось с самых первых источников синхротронного излучения и в настоящее время целая серия станций по спектроскопии поглощения функционируют для решения рутинных задач на каждом синхротронном источнике. В настоящее

время продемонстрирована серия методических подходов, позволяющая получать недоступную ранее информацию на источниках синхротронного излучения с высокой яркостью. Концепция предлагаемой станции спектроскопии стоит на принципах получения высокого разрешения и использовании абсорбционно-эмиссионной спектроскопии, что выделяет данный проект из ныне функционирующих станций. Предлагаемая идеология станции в ближайшие 10-15 лет станет доминирующей на источниках 4-го поколения. Результаты получаемые на та-

ком научном инструменте будут востребованы во многих областях наукоемкой индустрии, от катализа и материаловедения, до медицины и экологии. Таким образом, реализация этого проекта даст импульс развитию технологий экологически чистой энергетики, технологиям повышения эффективности добычи и переработки углеводородного сырья, решению задач здравоохранения и медицины, решению задач противодействия техногенным и биогенным угрозам.

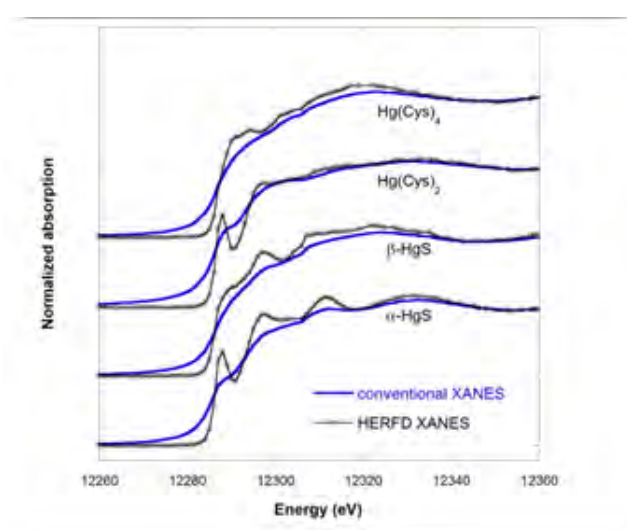


Рис. 4.14. Спектры сульфида ртути в α - и β -фазах

Экспериментальные методы.

- Спектроскопия поглощения рентгеновского излучения с высоким энергетическим разрешением (HERFD XAS)
- Рентгеновская эмиссионная спектроскопия (XES)
- Резонансное неупругое рассеяние рентгеновского излучения (RIXS).

Параметры станции:

- Энергетический диапазон 5—30 кэВ
- $\Delta E/E \sim 5 \cdot 10^{-5}$.

Источники излучения.

- Ондулятор с периодом 35 мм
- Ондулятор с периодом 40 мм.

Станция серийной кристаллографии

Область знаний. Макромолекулярная кристаллография; структурная биология; изучение динамики процессов, происходящих в молекулах белков; исследование кристаллов микроразмера методами серийной кристаллографии.

Концепция проекта. Станция нацелена на решение задач в области структурной биологии и проведения исследований структуры биологических макромолекул — исследование механизмов жизни на молекулярном уровне. Станция будет объединять в себе возможность проведения экспериментов как по серийной кристаллографии, так и стандартного эксперимента во вращающейся геометрии на кристаллах макромолекул (например, с возможностью сканирования кристалла пучком по спирали). Доставка образца на пучок в экспериментах по серийной кристаллографии будет реализована с помощью различных способов: инжекторов разных видов, mash-петель, а также с помощью методов с фиксированным образцом, подходящих и для стандартного эксперимента. Фокусирующий канал станции будет обеспечивать необходимую высокую плотность потока фотонов на образце с возможностью варьирования фокусного пятна (5—200 мкм) и изменение длины волны излучения в широком диапазоне. Дифрактомер MD3 обеспечит сверхвысокую точность позиционирования образца с возможностью его перемещения в пространстве по заданному алгоритму (сканирование по спирали и т.п.). Окружение образца позволит проводить исследования в широком диапазоне температур, а также позволит проводить исследования в среде контролируемой влажностью. Реализация метода pump-probe позволит исследовать процесс функционирования макромолекул под внешним воздействием и будет обеспечена за счёт наличия на станции лазера. Также станцию планируется оснастить роботизированным сменщиком образцов (с возможностью работы со стандартными револьверными держателями петель, аналогичными используемым на европейских синхротронах), что позволя-

ет полностью автоматизировать процесс измерений и открывает возможность использования станции пользователями в режиме удаленного доступа, достаточно будет прислать образцы в растворе или в контейнерах с жидким азотом. Станция позволяет проводить большое количество экспериментов: одно измерение с учётом подбора режима, загрузки образца и предварительной обработки данных занимает минуты. Данные будут храниться в общем цифровом пространстве и могут быть при необходимости открыты для обработки научными организациями.

Практическая значимость. Станция серийной кристаллографии позволит существенно расширить спектр биологических макромолекул, вирусов, органелл живых клеток, для которых будет доступно определение их трёхмерной атомарной структуры. Трёхмерная атомарная структура таких объектов полностью определяет их функции и свойства. Их функции, в свою очередь, полностью обеспечивают на молекулярном уровне функционирование всех живых организмов от вирусов, микроорганизмов до человека. Действие всех лекарственных препаратов основано на взаимодействии лекарства с биологическими макромолекулами, поэтому разработка всех лекарственных препаратов требует исследования структуры молекулы-мишени, моделирование молекулы лекарства, исследования структуры молекулы-мишени, связанной с молекулой-лекарством. Также знание пространственной структуры белка позволяет моделировать низкомолекулярные соединения, которые идеально стерически подходят к молекуле и блокируют или активируют ее функции. Далее на основе модельных соединений могут создаваться лекарственные препараты. Кроме фармацевтики, исследования, проводимые на станции серийной кристаллографии, необходимы для развития средств защиты сельскохозяйственных культур, развития биотехнологии. Исследования структуры макромолекул необходимы для развития технологий геномно-

го редактирования, разработки принципиально новых средств диагностики заболеваний человека, животных, растений. Ещё одна область применения — разработка методов хранения продуктов питания на основе исследования воздействия внешних условий на их молекулярный состав, разработка средств стерилизации продукции. Наличия такого максимально эффективного инструмента для определения структуры био-

логических молекул, как станция серийной кристаллографии, является одним из необходимых условий для обеспечения лидерства в области развития природоподобных технологий. Знания о структуре макромолекул важны для разработки гибридных устройств, биосенсоров, систем биокомпьютинга, мемристоров и других устройств, в которых функциональным элементом является биомолекула.

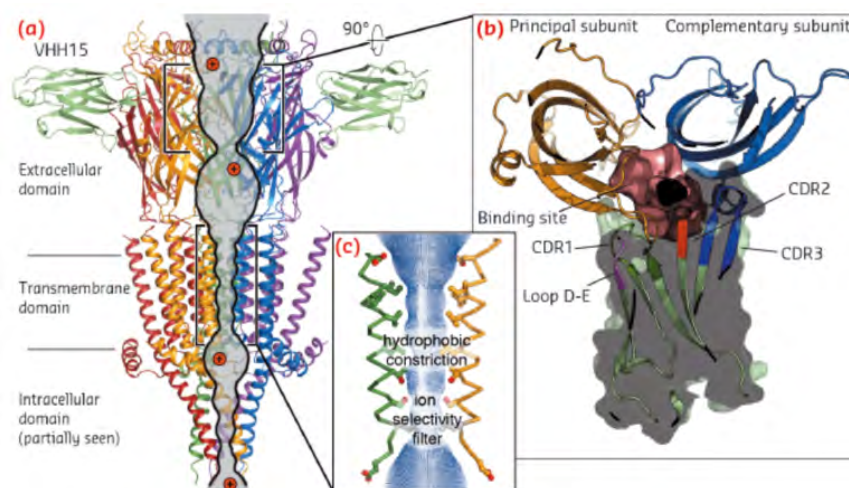


Рис. 4.15. Структура рецептора серотонина человека, впервые решенная на ESRF. Структура бактериальной рибосомы. Исследование механизмов резистивности бактерий к различным антибиотикам

Мировой уровень. Экспериментальные станции белковой кристаллографии на источниках синхротронного излучения являются основным источником информации о структуре биологических макромолекул, в частности, белков и нуклеиновых кислот. Функционирующие в настоящее время станции белковой кристаллографии ориентированы на проведение стандартного эксперимента в геометрии вращения на макромолекулах. Предлагаемый проект экспериментальной станции займёт уникальную нишу между классическими станциями и станциями серийной кристаллографии, строящимися на рентгеновских лазерах на свободных электронах. В настоящее время такие проекты находятся только в стадии обсуждения, а их полномасштабная реализация отложена до введения в строй синхротронных

источников четвёртого поколения. Работы в данной области дадут толчок технологиям персонализированной медицины, высокотехнологичному здравоохранению, технологиям дизайна и рационального применения новых лекарственных препаратов.

Экспериментальные методы.

- Серийная кристаллография (SSX)
- Монокристалльная дифракция (MX)
- Методы аномальной дифракции (MAD, SAD).

Параметры станции:

- Энергетический диапазон 5—20 кэВ
- $\Delta E/E \sim 10^{-4}$.

Источники излучения.

- Ондулятор с периодом 24—35 мм.

Станция исследований с временным разрешением

Область знаний. Исследование динамики переходных процессов и химических реакций, в том числе фотоиндуцированных, физики плазмы, серийной кристаллографии, веществ в условиях внешних воздействий, ударных волн, нелинейных эффектов, движения и взаимодействия молекул и атомов.

Концепция проекта. Станция нацелена на проведение исследований динамики структуры и свойств твёрдотельных, микрористаллических, газообразных и жидких систем, белковых комплексов в растворах и в кристаллическом состоянии с предельным пикосекундным временным разрешением. Получение разрешения по четвёртой координате — времени открывает новые возможности экспериментальных методов, основанных на изучении рассеяния, дифракции, поглощения и эмиссии рентгеновского излучения.

Базовым методом исследований станет техника pump-probe измерений (накачка-

зондирование), которая позволит получать информацию о различных динамических процессах с пикосекундным временным разрешением и обеспечит уникальную возможность для наблюдения физических процессов, химических реакций, движения отдельных атомов и молекул в нанометровом масштабе. Лазерная накачка вызывает изменения электронной структуры, колебания атомов, с помощью рентгеновского импульса с заданной временной задержкой регистрируется поглощение, эмиссия, усиление, дифракция или рассеяние. Для работы станции требуется введение особых режимов заполнения орбиты, применение наряду со стандартными оптическими элементами специальных «чопперов». Накачка обеспечивается набором мощных лазеров, в том числе фемтосекундными. Для проведения части измерений потребуются микрофлюидная ячейка, камеры с особым окружением образца.

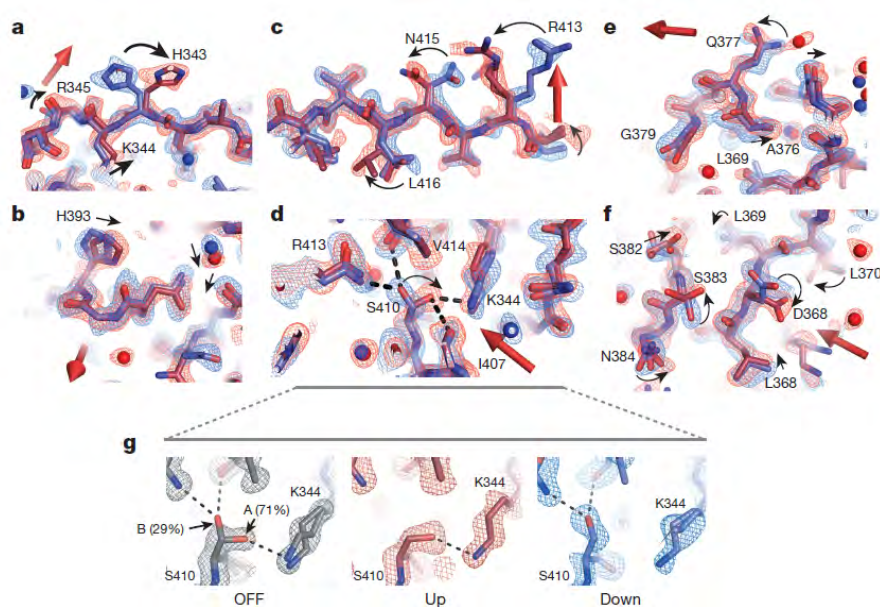


Рис. 4.16. Изучение с наносекундным временным разрешением перестройки структуры белков в условиях воздействия электрическими полями

Практическая значимость. Проведение исследований с временным разрешением важно для развития химической, мик-

роэлектронной, биологической, фармацевтической, энергетических и многих других отраслей. Данные исследования могут быть

полезны при разработке лекарств, катализаторов и ингибиторов химических реакций, аккумуляторных батарей и т.д.

Примеры исследований: Используя метод pump-probe можно непосредственно наблюдать за движением носителей в отдельных наноструктурах, например, исследовать диффузию свободных носителей заряда, миграцию экситонов и распространение плазмонов в наноструктурах. Также можно инициировать динамические структурные процессы и наблюдать за ними. Например, при помощи лазерных импульсов можно возбуждать структурный фазовый переход в кристаллическом материале, а затем, используя рентгеновский импульс, следить за процессом развития перехода. Также этот метод используется в фотоэмиссионной спектроскопии для исследования электронов в возбуждённых неравновесных состояниях, изучения формы волновой функции одиночных атомов и динамики изменения спина.

Мировой уровень. Эксперименты с высоким временным и пространственным разрешением — одни из главных вызовов современного материаловедения. Масштаб рассматриваемых времен может быть различен: от фемтосекунд до секунд и даже часов. В настоящее время существует ограниченное число специализированных станций (BESSY KMC3, ESRF ID09, APS 7ID, SOLEIL TEMPO), способных проводить эксперименты с пико-наносекундным временным разрешением с применением методики pump-probe. В то же время большинство экспериментов с типичным временным разрешением до микросекунд проводятся на обычных синхротронных станциях, оснащённых высокоскоростными детекторами или, например, быстрыми рентгенооптическими элементами.

Некоторые эксперименты, хотя и не с таким высоким разрешением, могут быть реализованы и на относительно маломощных источниках излучения, однако на практике такие исследования в основном проводятся на синхротронах 3—4 поколений и

рентгеновских лазерах на свободных электронах (ЛСЭ). Одной из причин является то, что, как правило, регистрируются минимальные изменения картин, находящиеся на грани погрешности измерения, а время накопления достаточной статистики даже на мощных источниках весьма значительно. Относительно ЛСЭ синхротронное излучение обладает рядом объективных и субъективных преимуществ и недостатков. Например, предельное временное разрешение на ЛСЭ лучше и достигает фемтосекунд, однако исследовать процессы дольше 1 нс нецелесообразно, эксперименты на ЛСЭ гораздо менее доступны, образцы полностью разрушаются, и их требуется много, есть ограничения по энергии излучения, а параметры пучка флуктуируют от импульса к импульсу. Pump-probe-эксперименты на синхротронных источниках более доступны, зачастую образцы полностью не разрушаются, и их можно использовать повторно, есть возможность использования высоких энергий пучка, обеспечивается высокая стабильность положения пучка. Временной диапазон исследований — от 100 пс до единиц секунд и более.

Предлагаемый проект экспериментальной станции закроет нишу времязадающих экспериментов между ЛСЭ и классическими синхротронными экспериментами.

Экспериментальные методы.

- Рентгеновская дифрактометрия (XRD);
- Дифракция скользящего падения, малоугловое рассеяние (GID, SAXS, WAXS);
- Серийная кристаллография (MX);
- Спектроскопия эмиссионная и поглощения (XAS, XES);
- Когерентная дифракция и имиджинг (CDI, CXDI)

Параметры станции:

- Энергетический диапазон 5—50 кэВ
- $\Delta E/E \sim 10^{-4}$.
- Пикосекундное временное разрешение, короткие и изолированные импульсы.

Станция фотоэлектронной спектроскопии в мягкой рентгеновской области

Область знаний. Наука о материалах, физика поверхности, физика наносистем, полупроводниковые технологии, сильно коррелированные системы.

Концепция проекта. Станция предназначена для исследования атомной и электронной структуры с использованием низкоэнергетического рентгеновского излучения и решения как фундаментальных задач по физике поверхности, так и прикладных задач микро- и нанoeлектроники. Станция нацелена на решение задач физики твёрдого тела, наноструктур, двумерных материалов, полупроводниковых технологий, микро- и нанoeлектроники с использованием фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением (SR-ARPES), а также фотоэмиссионной электронной микроскопии (PEEM).

Практическая значимость. Станция будет нацелена на решение задач в интересах химической промышленности, фармацевтики, медицины, добычи полезных ресурсов, металлургии и микроэлектроники. Решение задач каталитической химии – разработка, анализ и внедрение новых каталитических систем на основе наноструктурированных материалов. Исследование процессов и путей протекания химических реакций с целью оптимизации технологии и синтеза новых химических веществ. Наука о материалах – исследование зонной структуры и особенностей дисперсии электронов в двумерных системах, топологических изоляторах, мемристорах, сверхпроводниках, интерфейсах и слоистых системах для решения большого спектра задач по созданию новых устройств микро и нанoeлектроники, в том числе основанных на новых принципах работы, таких как спинтроника, для дальнейшего роста производительности и миниатюризации электронных устройств.

Мировой уровень. Станции фотоэлектронной спектроскопии широко распространены на мягких синхротронных источниках.

Предлагаемый проект базируется на инновационных разработках в области электронной спектроскопии, позволяющих получать изображение поверхности в сигнале фотоэлектронов, а также позволяющих работать с “влажными” образцами при высоком давлении. Такая комбинация экспериментальных возможностей в настоящее время не реализована в едином инструменте.

Экспериментальные методы.

- Фотоэлектронная спектроскопия (XPS)
- Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES)
- Фотоэлектронная спектроскопия в жестком рентгеновском диапазоне (HAXPES)
- Фотоэлектронная спектроскопия при давлениях близких к атмосферному (NAP-XPS);
- Рентгеновская спектроскопия поглощения (XAS).

Параметры станции:

- Энергетический диапазон: 100-2000 эВ
- $\Delta E/E = 5 \cdot 10^{-5}$
- Работа с круговой (левой, правой) и переменной линейной поляризации в пределах $0 - 180^\circ$.
- Фокусирующая оптика на базе асферических зеркал и монохроматора с плоскими решётками.
- Размер фокального пятна $\sim 20 \times 20$ мкм.
- Фотоэлектронный спектрометр с угловым и спиновым разрешением (SR-ARPES);
- Фотоэмиссионный электронный микроскоп (PEEM) с пространственным разрешением ~ 10 нм.

Источники излучения.

- Эллиптический ондулятор с периодом 125 нм.

Часть III

Научно-организационная
деятельность.
Публикации

Глава 5

Научно-организационная деятельность

Тематические семинары ККСНИ

В ККСНИ на постоянной основе действуют два семинара, на которых регулярно заслушиваются результаты работ сотрудников комплекса, публикации, подготовленные для подачи в печать, а также выступают исследователи из других организаций с докладами либо о результатах, полученных на экспериментальных установках ККСНИ, либо об исследованиях, которые потенциально требуют их применения. Ниже приведены названия докладов наиболее интересных семинаров 2019 года.

Совместный семинар отделов синхротронных и нейтронных исследований

Руководитель: **А.Е. Благов.**

19 декабря. Фазовые переходы в dTe . М. Д. Павлюк (Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова, РАН)

26 сентября. Фотоэлектронная спектроскопия в диапазоне мягкого рентгеновского излучения: от кристаллических твёрдых тел к гетероструктурам и примесным системам. В. Строков (Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, Switzerland)

19 сентября. Доклады работ, выдвигаемых на конкурс на соискание премии им. **И. В. Курчатова НИЦ «Курчатовский институт»:**

1. Экспериментальное и теоретическое исследование адсорбции и самоорганизации полярных молекул $C_{60}F_{18}$ на металлических поверхностях. Р. Г. Чумаков, А. В. Горячевский (Отдел синхротронных экспериментальных станций ККСНИ).

2. Применение и развитие комплексных подходов к структурной диагностике функциональных материалов с использованием синхротронного излучения и нейтронов. Р. Д. Светогоров, В. А. Лазаренко (Отдел синхротронных экспериментальных станций ККСНИ).

3. Разработка концепции ускорительного комплекса источника синхротронного излучения четвертого поколения на энергию 6 ГэВ и оптимизация параметров основного накопителя и систем инжекции пучка. В. С. Дюбков, Д. А. Лякин, С. М. Полозов, А. А. Тищенко, Е. А. Фомин (ОНУТ ККСНИ, Отдел ускорителей и источников СИ).

4. "Динамика пучка электронов в основном накопителе специализированного источника синхротронного излучения ИССИ-4". В. Ю. Механикова (Отделение новых ускорительных технологий ККСНИ).

Доклады работ, выдвигаемых на конкурс на соискание премии правительства Москвы молодыми учёными:

1. Цикл работ по развитию методов фотоэлектронной спектроскопии для анализа наноразмерных систем. Р. Г. Чумаков (Отдел синхротронных экспериментальных станций

ККСНИ).

2. Применение синхротронного излучения для исследования примесей золота и платины в геологических объектах — минералах и флюидах. А. Л. Тригуб (Отдел синхротронных экспериментальных станций ККСНИ.)

29 августа. 1. Развитие рентгеноакустических методов исследования дефектной структуры кристаллов. Я. А. Элиович (Отдел синхротронно-нейтронных и рентгеновских исследований ККСНИ) Доклад по материалам диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук.

2. Образование приповерхностных структур в кристаллах парателлурита и тетрабората лития за счет миграции носителей заряда во внешнем электрическом поле. А. Г. Куликов (Отдел синхротронных экспериментальных станций ККСНИ.) Доклад по материалам диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук.

18 июля. Исследование влияния примесей и металлических сплавов на фазовые превращения механически размолотых фуллеренов при высоких температурах и высоких давлениях. П. А. Борисова (Отдел нейтронных экспериментальных станций ККСНИ).

27 июня. Подготовка и проведение эксперимента по анализу единичных вирионов вируса клещевого энцефалита на XFEL. В. Р. Самыгина (отдел структурной биологии НБИКС-пт.)

20 июня. 1. Исследования структурных особенностей стабилизации систем биосовместимых наночастиц магнетита методами рассеяния рентгеновского излучения. А. В. Шуленина (Отдел синхротронно-нейтронных и рентгеновских исследований ККСНИ). Доклад по материалам диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук.

16 мая. 1. Перспективы развития кремниевых наноструктур в энергетике и медицине. В. Сиваков, Лейбниц Институт Фотонных Технологий, г. Йена, Германия. (По материалам проекта РФФ.)

2. Синхротронные спектромикроскопические методы исследования кремниевых наноструктур в ультрамягкой рентгеновской области С. Ю. Турищев, Воронежский Государственный Университет, г. Воронеж. (По материалам проекта РФФ.)

25 апреля. 1. Электронная структура и локальное атомное строение координационных соединений по данным рентгеновской спектроскопии. В. Г. Власенко, Южный Федеральный Университет, г. Ростов-на-Дону. (По материалам диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук.)

2. Диагностика нарушений структуры сложных оксидов $Ln_2Hf_2O_7$ (Ln – лантаноид) с помощью аномальной рентгеновской дифракции Н. А. Колышкин (Отдел синхротронно-нейтронных и рентгеновских исследований ККСНИ.)

18 апреля. 1. ИССИ-4: Первые шаги и перспективы. Н. В. Марченков (ККСНИ.)

2. Рентгеновское переходное излучение ультрарелятивистских электронов от периодических структур". А. А. Савченко (Отделение новых ускорительных технологий ККСНИ)

11 апреля. Рентгеноструктурный анализ кристаллов на Курчатовском источнике синхротронного излучения. Возможности и перспективы развития. В. А. Лазаренко. (Отдел синхротронных экспериментальных станций ККСНИ)

28 марта. Анатолий Петрович Александров - судьба и атомный проект. П. А. Александров.

21 марта. Фотоэмиссия с угловым и пространственным разрешением на источнике СИ Даймонд. П. В. Дудин (Diamond Synchrotron, Дидкот, Великобритания.)

Источники синхротронного излучения, новые методы ускорения, физика и техника ускорителей

Руководитель: **В. Н. Корчуганов.**

7 марта 1. Новые сверхпроводящие вигглеры для КИСИ. А. Г. Валентинов (Управление и эксплуатация ресурсного центра.)

2. Курчатовский источник синхротронного излучения: от 2-го поколения к 4-ому. Е. А. Фомин (Управление и эксплуатация ресурсного центра.)

28 февраля. 1. Физика Синхротронного Излучения. В. Н. Корчуганов. (Руководство ККСНИ.) 2. Ондуляторы и ондуляторное излучение на источнике СИ 4-го поколения. Н. В. Смоляков (Управление и эксплуатация ресурсного центра.)

31 января. 1. Разработка и оптимизация системы инжекции пучка для проектируемого источника синхротронного излучения 4-го поколения ИССИ-4. Т. В. Кулевой (Отделение новых ускорительных технологий ККСНИ.) 2. Разработка и оптимизация основного накопителя проектируемого источника синхротронного излучения 4-го поколения ИССИ-4. С. М. Полозов. (Отделение новых ускорительных технологий ККСНИ.)

Конференции и стажировки

7-ая Европейская Конференция по рассеянию нейтронов (VII European Conference on Neutron Scattering, ECNS-2019)

С 30 июня по 5 июля 2019 г. в Санкт-Петербурге в Центральном выставочном зале "Манеж" состоялась 7-я Европейская Конференция по рассеянию нейтронов (VII European Conference on Neutron Scattering, ECNS-2019) (далее – Конференция). В торжественной церемонии открытия приняли участие врио губернатора Санкт-Петербурга Александр Беглов, председатель Конференции ECNS 2019, президент НИЦ "Курчатовский институт" М. В. Ковальчук, директор НИЦ «Курчатовский институт» А. Е. Благоев.



Конференция проводится раз в четыре года и является самой масштабной площадкой для обсуждения последних событий и достижений в применении рассеяния нейтронов во всех областях науки. В этом году в Конференции приняли участие более 800 учёных из 38 стран. Начальник отдела нейтронных экспериментальных станций ККСНИ В.Т. Эм выступил с приглашенным докладом "Новые установки для материаловедения СТРЕСС и ДРАКОН: первые результаты".

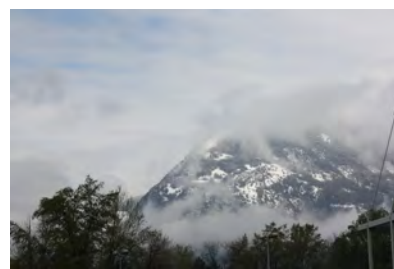
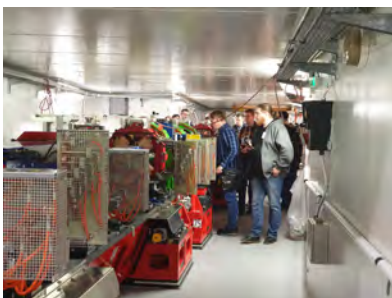
В рамках Конференции 3–4 июля под председательством М. В. Ковальчука прошел микросимпозиум «Синхротронные и нейтронные исследования и инфраструктура для их реализации», на котором ведущие ученые обсудили долгосрочную программу развития синхротронно-нейтронных исследований в Российской Федерации, изменения мирового синхротронного ландшафта, текущий статус и перспективы участия России в международных мегапроектах.

В рамках микросимпозиума была организована работа нескольких сессий. На сессии «Российская ассоциация пользователей синхротронного излучения и нейтронов» с устным докладом «Пользователи Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований» выступил и.о. руководителя ККСНИ Н.В. Марченков.

На сессии «Ускорительные технологии в России» выступили с устными докладами руководитель отделения новых ускорительных технологий ККСНИ Т. В. Кулевой («Технологии линейных ускорителей ионов и электронов»), заместитель руководителя отделения новых ускорительных технологий ККСНИ С. М. Полозов («Прогресс в разработке и производстве сверхпроводящих ускоряющих резонаторов в России»), заместитель руководителя ККСНИ по перспективным ускорительным технологиям В. Н. Корчуганов («Проект модернизации Курчатовского источника синхротронного излучения»).

На микросимпозиуме «Естественно-научные методы в изучении культурного наследия» с устным докладом «Изучение древних пигментов и красок физико-химическими методами» выступил заместитель руководителя ККСНИ Р. А. Сенин. Всего в работе конференции приняли участие более 20 сотрудников ККСНИ.

Стажировка сотрудников в ESRF



С 31 марта по 6 апреля исследовательский ускорительный комплекс синхротронный центр ESRF, расположенный во Франции, проводил "Russian Training School" (Школа для молодых российских учёных). В работе школы приняли участие более 15 сотрудников ККСНИ.

По результатам визита на школу каждый из сотрудников сделал доклад и подготовил главу в отчёт о визите. По итогам визита подготовлен сводный научный отчёт об особенностях организации работы ESRF, конструкции и структуре ряда экспериментальных станций. Сотрудники ознакомились как с процессом модернизации ускорительно-накопительного комплекса, так и с конструкцией новых экспериментальных станций ESRF-EBS. Данный опыт был полезен при разработке концептуальных проектов экспериментальных станций синхротрона СИЛА.

Глава 6

Список публикаций сотрудников комплекса

Биомедицинские исследования

1. Kovalchuk M. V. et al. Structural characteristics of lysozyme Langmuir layers grown on a liquid surface from an oligomeric mixture formed during the early stages of lysozyme crystallization //Thin Solid Films. – 2019. – Т. 677. – С. 13-21.
2. Marchenkova M. A. et al. The binding of precipitant ions in the tetragonal crystals of hen egg white lysozyme //Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. – 2019. – С. 1-14.
3. Novikova N. N. et al. The Enhancement of Metal-Binding Properties in Hemoglobin: The Role of Mild Damaging Factors //The Journal of Physical Chemistry B. – 2019. – Т. 123. – №. 40. – С. 8370-8377.
4. Tomilin F. N. et al. Four steps for revealing and adjusting the 3D structure of aptamers in solution by small-angle X-ray scattering and computer simulation //Analytical and Bioanalytical Chemistry. – 2019. – Т. 411. – №. 25. – С. 6723-6732.
5. Popov A. M. et al. Development of a Microfluidic Chip for Protein Crystallization by the Microbatch Method //Crystallography Reports. – 2019. – Т. 64. – №. 2. – С. 282-286.
6. Arkhipov S. G. et al. The role of S-bond in tenoxicam keto-enolic tautomerization //CrystEngComm. – 2019. – Т. 21. – №. 36. – С. 5392-5401.
7. Kotlobay A. A. et al. Bioluminescence chemistry of fireworm *Odontosyllis* //Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2019. – Т. 116. – №. 38. – С. 18911-18916.
8. Zayats E. A. et al. An explanation for the narrow carbohydrate substrate specificity of adenine phosphoribosyltransferase from *Thermus thermophilus* from the model of the enzyme, substrate, and magnesium cation cofactor complex //Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. – 2019. – Т. 37. – №. 17. – С. 4460-4464.
9. Marchenkova M. A. et al. Dodecamers derived from the crystal structure were found in the pre-crystallization solution of the transaminase from the thermophilic bacterium *Thermobaculum terrenum* by small-angle X-ray scattering //Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. – 2019. – С. 1-6.
10. Petrenko D. E. et al. Molecular dynamics complemented by site-directed mutagenesis reveals significant difference between the interdomain salt bridge networks stabilizing oligopeptidases B from bacteria and protozoa in their active conformations //Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. – 2019. – С. 1-15.
11. Zeifman Y. S. et al. Functional characterization of PLP fold type IV transaminase with a mixed type of activity from *Haliangium ochraceum* //Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Proteins and Proteomics. – 2019. – Т. 1867. – №. 6. – С. 575-585.
12. Sidorov-Biryukov D. D. et al. Molecular Dynamics Study of Thymidine Phosphorylase from *E. coli* in the Apo Form and in Complexes with Substrates //Crystallography Reports. – 2019. – Т. 64. – №. 1. – С. 98-104.
13. Agapova Y. K. et al. Virtual Screening Targeting Dimerization Signals of Two *Mycoplasma HU* Proteins Revealed Different Types of Inhibitors Interacting with Common Binding Determinants // Crystallography Reports. – 2019. – Т. 64. – №. 4. – С. 602-607.

14. Agapova Y. K., Timofeev V. I., Komolov A. S. Molecular Dynamics Study of Triazole Derivative Binding to the Active Site of Imidazole Glycerol Phosphate Dehydratase from *Mycobacterium tuberculosis* // Crystallography Reports. – 2019. – T. 64. – №. 4. – С. 608-610.
15. Podshivalov D. D. et al. Modeling of Phosphoribosylpyrophosphate Synthetase from *Thermus Thermophilus* in Complex with ATP and Ribose 5-Phosphate // Crystallography Reports. – 2019. – T. 64. – №. 1. – С. 94-97.

Науки о Земле и экология

16. Tagirov B. R. et al. Gold transport in hydrothermal chloride-bearing fluids: Insights from in situ x-ray absorption spectroscopy and ab initio molecular dynamics // ACS Earth and Space Chemistry. – 2018. – T. 3. – №. 2. – С. 240-261.
17. Filimonova O. N. et al. The state of platinum in pyrite studied by X-ray absorption spectroscopy of synthetic crystals // Economic Geology. – 2019. – T. 114. – №. 8. – С. 1649-1663.
18. Filimonova O. N. et al. Substitution mechanisms in In-, Au-, and Cu-bearing sphalerites studied by X-ray absorption spectroscopy of synthetic compounds and natural minerals // Mineralogical Magazine. – 2019. – T. 83. – №. 3. – С. 435-451.
19. Tagirov B. R. et al. Platinum transport in chloride-bearing fluids and melts: Insights from in situ X-ray absorption spectroscopy and thermodynamic modeling // Geochimica et Cosmochimica Acta. – 2019. – T. 254. – С. 86-101.
20. Minkina T. et al. Molecular characterization of Zn in Technosols using X-ray absorption spectroscopy // Applied geochemistry. – 2019. – T. 104. – С. 168-175.
21. Filimonova O. et al. X-ray absorption spectroscopy study of the chemistry of «invisible» Au in arsenian pyrites // E3S Web of Conferences. – EDP Sciences, 2019. – T. 98. – С. 05007.
22. Minkina T. et al. Quantitative speciation of Zn in technosols using chemical fractionation and X-ray absorption spectroscopy // Geochemistry: Exploration, Environment, Analysis. – 2019. – T. 19. – №. 2. – С. 101-109.

Кристаллография и рост кристаллов

23. Kovalchuk M. V. et al. Investigation of the Structure of Crystal-Forming Solutions of Potassium Dihydrogen Phosphate K (H₂PO₄)(KDP type) on the Basis of Modeling Precursor Clusters and According to Small-Angle X-Ray Scattering Data // Crystallography Reports. – 2019. – T. 64. – №. 1. – С. 6-10.
24. Kovalchuk M. V. et al. Pre-crystallization phase formation of thermolysin hexamers in solution close to crystallization conditions // Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. – 2019. – T. 37. – №. 12. – С. 3058-3064.
25. Egorysheva A. V. et al. $LnGa_{0.5}Sb_{1.5}O_6$ Complex Oxides with a Rosiaite-Type Structure: Synthesis, Structure, and Thermal Properties // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2019. – T. 64. – №. 9. – С. 1073-1080.
26. Dudnikov V. A. et al. Structural, Magnetic, and Thermodynamic Properties of Ordered and Disordered Cobaltite $Gd_{0.1}Sr_{0.9}CoO_{3-\delta}$ // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2019. – T. 128. – №. 4. – С. 630-640.
27. Kulikov A. G. et al. Variation of a Defect Structure of Lithium Tetraborate ($Li_2B_4O_7$) in an External Electric Field // Physics of the Solid State. – 2019. – T. 61. – №. 4. – С. 548-554.
28. Savchenkov A. V. et al. Uranyl Coordination Compounds with Alkaline Earth Metals and Crotonate Ligands // ChemistrySelect. – 2019. – T. 4. – №. 29. – С. 8416-8423.
29. Dorovatovskii P. V. et al. Crystal structure of dimethyl (3aS, 6R, 6aS, 7S)-2-pivaloyl-2, 3-dihydro-1H, 6H, 7H-3a, 6: 7, 9a-diepoxybenzo [de] isoquinoline-3a1, 6a-dicarboxylate, $C_{21}H_{25}NO_8$ // Zeitschrift für Kristallographie-New Crystal Structures. – 2019. – T. 234. – №. 2. – С. 205-207.

30. Sukharev V. A. et al. Crystal growth and luminescent properties of LiNa₅Mo₉O₃₀ //Journal of Crystal Growth. – 2019. – T. 519. – C. 35-40.
31. Vlasenko V. G. et al. Electrochemical synthesis, structural, spectral studies and DFT calculations of heteroleptic metal-chelates bearing *N,N,S* tridentate tosylamino functionalized pyrazole containing Schiff base and 1, 10-phenanthroline //Polyhedron. – 2019. – T. 157. – C. 6-17.
32. Vtyurina D. N. et al. Structural peculiarities, point defects and luminescence in *Bi*-doped *CsCdX₃* (*X* = *Cl, Br*) single crystals //Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – T. 803. – C. 912-921.
33. Myasnikova L. et al. The Crystalline Structure of Nascent Ultra High Molecular Weight Single Particles and Its Change on Heating, as Revealed by in-situ Synchrotron Studies //Journal of Macromolecular Science, Part B. – 2019. – T. 58. – №. 11. – C. 847-859.
34. Sulyanov S. N. et al. Mesomorphic and structural properties of liquid crystalline side-chain polymethacrylates: from smectic C* to columnar phases //Liquid Crystals. – 2019. – T. 46. – №. 6. – C. 825-834.
35. Bobrovsky A. et al. The effect of spacer and alkyl tail lengths on the photoorientation processes in amorphousized films of azobenzene-containing liquid crystalline polymethacrylates //Liquid Crystals. – 2019. – C. 1-7.
36. Dyakova Y. A. et al. Study of the influence of a precipitant cation on the formation of oligomers in crystallization solutions of lysozyme protein //Crystallography Reports. – 2019. – T. 64. – №. 1. – C. 11-15.
37. Folomeshkin M. S. et al. X-ray Diffraction Analysis and Electron Microscopy of the Carbon Fiber Structure //Crystallography Reports. – 2019. – T. 64. – №. 1. – C. 1-5.
38. Zhigunov D. M. et al. Near-IR Emitting Si Nanocrystals Fabricated by Thermal Annealing of *SiN_x/Si₃N₄* Multilayers //Applied Sciences. – 2019. – T. 9. – №. 22. – C. 4725.
39. Woo W. et al. Multi-scale analyses of constituent phases in a trip-assisted duplex stainless steel by electron backscatter diffraction, in situ neutron diffraction, and energy selective neutron imaging //Scripta Materialia. – 2019. – T. 158. – C. 105-109.
40. Sulyanova E. A. et al. Nanostructured Crystals of Fluorite Phases *Sr_{1-x}R_xF_{2+x}* (*R* Are Rare-Earth Elements) and Their Ordering. 13: Crystal Structure of *SrF₂* and Concentration Dependence of the Defect Structure of Nonstoichiometric Phase *Sr_{1-x}La_xF_{2+x}* As Grown (*x* = 0.11, 0.20, 0.32, 0.37, 0.47) //Crystallography Reports. – 2019. – T. 64. – №. 1. – C. 41-50.
41. Khmelnitski R. A. et al. Effect of the electronic kinetics on graphitization of diamond irradiated with swift heavy ions and fs-laser pulses //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2019. – T. 460. – C. 47-51.

Химия и катализ

42. Dyachenko I. V. et al. Multicomponent synthesis and molecular structure of 3-amino-2-aryl (alkoxycarbonyl, arylcarbamoyl)-4-aryl (hetaryl)-5-arylcarbamoyl-6-methylthieno [2, 3-b] pyridines //Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2019. – T. 55. – №. 4-5. – C. 442-447.
43. Nadirova M. A. et al. Synthesis and Structure of Esterification Products of 6-aryl-1, 2, 3, 6, 7, 7a-hexahydro-3a, 6-epoxyisoindole-7-carboxylic Acids //Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2019. – T. 55. – №. 8. – C. 729-738.
44. Dyachenko I. V. et al. Synthesis, molecular and crystalline structure of 2-(alkylsulfanyl)-4-aryl (hetaryl)-5, 6, 7, 8-tetrahydroquinoline-3-carbonitriles //Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2019. – T. 55. – №. 9. – C. 839-843.
45. Luk O. A. et al. High-energy 4 (10)-2-fluoro-2, 2-dinitroethyl and 4 (10)-2, 2-dinitropropyl derivatives of polynitrohexaazaisowurtzitanes //Russian Chemical Bulletin. – 2019. – T. 68. – №. 1. – C. 110-115.
46. Kokorin A. I. et al. The Structure and Internal Dynamics of R 6-p-C 6 H 4-R 6 Biradical: EPR, X-ray Crystallography and DFT Calculations //Applied Magnetic Resonance. – 2019. – T. 50. – №. 1-3. – C. 425-439.
47. Tarasenko E. A. et al. Effect of Metal Cations on the Kinetics of Formation and Structure of Gels Formed during the Acid Hydrolysis of Tetraethoxysilane //Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2019. – T. 93. – №. 9. – C. 1737-1740.

48. Lebedeva O. E. et al. Stabilization of Cerium (III) in the Structure of Hydrotalcite-Like Layered Double Hydroxides //Petroleum Chemistry. – 2019. – T. 59. – №. 7. – C. 751-755.
49. Cherkashina N. V. et al. The First Heterometallic Acetate-Bridged Pt (II)–Pd (II) Complex: Synthesis, Structure, and Formation of Bimetallic PtPd 2 Nanoparticles //Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2019. – T. 45. – №. 4. – C. 253-265.
50. Dyachenko I. V. et al. Multicomponent Synthesis of Thiazole, Selenazole, Pyrane, and Pyridine Derivatives, Initiated by the Knoevenagel Reaction //Russian Journal of Organic Chemistry. – 2019. – T. 55. – №. 2. – C. 215-226.
51. Dyachenko I. V. et al. New Synthesis of Functionalized Nicotinamides //Russian Journal of Organic Chemistry. – 2019. – T. 55. – №. 7. – C. 1019-1033.
52. Dyachenko I. V. et al. Synthesis of Functionalized Partially Hydrogenated Quinolines by a Stork Reaction – Intramolecular Transamination – Alkylation Tandem Protocol //Russian Journal of Organic Chemistry. – 2019. – T. 55. – №. 8. – C. 1177-1188.
53. Davydov V. V. et al. Crystal, Molecular, Electronic Structures and Spectroscopic Characteristics of N-Hydroxyamide of 3-[3, 3-Dimethyl-1, 2, 3, 4-Tetrahydroisoquinolin-1-Iden]-2-Oxopropanoic Acid //Journal of Structural Chemistry. – 2019. – T. 60. – №. 9. – C. 1396-1406.
54. Egorysheva A. V. et al. $LnGa_{0.5}Sb_{1.5}O_6$ Complex Oxides with a Rosiaite-Type Structure: Synthesis, Structure, and Thermal Properties //Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2019. – T. 64. – №. 9. – C. 1073-1080.
55. Lebedeva O. E. et al. Stabilization of Cerium (III) in the Structure of Hydrotalcite-Like Layered Double Hydroxides //Petroleum Chemistry. – 2019. – T. 59. – №. 7. – C. 751-755.
56. Burlov A. S. et al. Chemical and electrochemical synthesis, structure, photoluminescent properties, and biological activity of 4-methyl-N-[2-[(Z)-2-(2-pyridyl) alkyliminomethyl] phenyl] benzenesulfamide zinc (II) complexes //Applied Organometallic Chemistry. – 2020. – T. 34. – №. 1. – C. e5302.
57. Shevaldina E. V. et al. One-pot acid-free ferrocenylalkylation of azoles with α -ferrocenyl alcohols: ferrocene-based plant growth regulators and herbicide safeners //Applied Organometallic Chemistry. – 2019. – T. 33. – №. 11. – C. e5228.
58. Burlov A. S. et al. Synthesis, Structure and Magnetic Properties of Copper (II) Complexes of Diphenyl-(1-propylbenzimidazol-2-yl) methanol //ChemistrySelect. – 2019. – T. 4. – №. 29. – C. 8652-8654.
59. Zelinskii G. E. et al. Iron (II) Clathrochelate with Terminal Triple $C \equiv C$ Bond and Its Carboran-oclathrochelate Derivative with a Flexible Linker between the Polyhedral Cages: Synthesis and X-Ray Structure. // Chemistry Select. – 2019. – T. 4. – №. 39. – C. 11572-11577.
60. Lysova A. A. et al. Tuning the Molecular and Cationic Affinity in a Series of Multifunctional Metal–Organic Frameworks Based on Dodecanuclear Zn (II) Carboxylate Wheels //Journal of the American Chemical Society. – 2019. – T. 141. – №. 43. – C. 17260-17269.
61. Bulavchenko O. A. et al. The Influence of Cu and Al Additives on Reduction of Iron (III) Oxide: In Situ XRD and XANES Study //Inorganic Chemistry. – 2019. – T. 58. – №. 8. – C. 4842-4850.
62. Petrov A. A. et al. Methylammonium Polyiodides: Remarkable Phase Diversity of the Simplest and Low-Melting Alkylammonium Polyiodide System //The journal of physical chemistry letters. – 2019. – T. 10. – №. 19. – C. 5776-5780.
63. Yapryntsev A. et al. Eu-Doped layered yttrium hydroxides sensitized by a series of benzenedicarboxylate and sulphobenzoate anions //Dalton Transactions. – 2019. – T. 48. – №. 18. – C. 6111-6122.
64. Spitsyna N. G. et al. Spin-crossover behavior of neutral iron (iii) complexes with salicylaldehyde thio-, seleno-and semicarbazone ligands: experiment and theoretical analysis //Dalton Transactions. – 2019. – T. 48. – №. 25. – C. 9328-9336.
65. Dubinina T. V. et al. Sandwich double-decker *Er* (iii) and *Yb* (iii) complexes containing naphthalocyanine moiety: synthesis and investigation of the effect of a paramagnetic metal center //Dalton Transactions. – 2019. – T. 48. – №. 35. – C. 13413-13422.
66. Litvinova Y. M. et al. Metal–organic frameworks based on polynuclear lanthanide complexes and octahedral rhenium clusters //Inorganic Chemistry Frontiers. – 2019. – T. 6. – №. 6. – C. 1518-1526.
67. Pushkarev A. S. et al. Pt/C and Pt/SnOx/C catalysts for ethanol electrooxidation: rotating disk electrode study //Catalysts. – 2019. – T. 9. – №. 3. – C. 271.

68. Tereshchenko A. et al. Ultra-Small Pd Nanoparticles on Ceria as an Advanced Catalyst for CO Oxidation //Catalysts. – 2019. – T. 9. – №. 4. – C. 385.
69. Astakhov G. S. et al. New Cu_4Na_4 -and Cu_5 -Based Phenylsilsesquioxanes. Synthesis via Complexation with 1, 10-Phenanthroline, Structures and High Catalytic Activity in Alkane Oxidations with Peroxides in Acetonitrile //Catalysts. – 2019. – T. 9. – №. 9. – C. 701.
70. Grinberg V. A. et al. Nanosized catalysts of oxygen reduction reaction prepared on the base of bimetallic cluster compounds //Electrochimica Acta. – 2019. – T. 299. – C. 886-893.
71. Rudnitskaya O. V. et al. A balance of redox and ligand-exchange processes in the reaction of $H_2[OsCl_6]$ with thiourea: Isolation and characterization of a novel osmium complex $[(NH_2)2CSSC(NH_2)2]2[OsIVCl_6]Cl_2 \cdot 3H_2O$. //Inorganica Chimica Acta. – 2019. – T. 484. – C. 352-356.
72. Tuskaev V. A. et al. Novel alkoxo-titanium (IV) complexes with fluorinated 2-hydroxymethylphenol derivatives as catalysts for the formation of ultra-high molecular weight polyethylene nascent reactor powders //Inorganica Chimica Acta. – 2019. – T. 498. – C. 119159.
73. Khamidullina L. A. et al. Synthesis, characterization, DFT calculations, and biological activity of copper (II) complexes with 1, 1, 1-trifluoro-4-(2-methoxyphenyl) butan-2, 4-dione //Journal of Molecular Structure. – 2019. – T. 1176. – C. 515-528.
74. Kulakova A. N. et al. The first tris-heteroleptic copper cage, ligated by germesquioxanes, 2, 2'-bipyridines and 3, 5-dimethylpyrazolates. Synthesis, structure and unique catalytic activity in oxidation of alkanes and alcohols with peroxides //Journal of Organometallic Chemistry. – 2019. – T. 899. – C. 120911.
75. Zelinskii G. E. et al. Molecular design and structural peculiarities of the 3-and 4-pyridylboron-capped tris-glyoximate and tris-dichloroglyoximate iron (II) clathrochelates with apical donor groups // Polyhedron. – 2019. – T. 160. – C. 108-114.
76. Egorysheva A. V. et al. Synthesis and characterization of new isostructural series $LnFe_{0.5}Sb_{1.5}O_6$ ($Ln = La - Sm$) exhibiting high catalytic activity in CO oxidation //Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – T. 777. – C. 655-662.
77. Mamedov I. G. et al. Efficient synthesis of new tricyclic pyrano [3, 2-c] pyridine derivatives //Mendeleev Communications. – 2019. – T. 29. – №. 2. – C. 232-233.
78. Tsyganov D. V. et al. Arylglyoxal oximes as putative C-nucleophiles in eliminative nucleophilic substitution process //Mendeleev Communications. – 2019. – T. 29. – №. 3. – C. 296-298.
79. Tuskaev V. A. et al. Nickel (II) complexes with tripodal NNN ligands as homogenous and supported catalysts for ethylene oligomerization //Molecular Catalysis. – 2019. – T. 464. – C. 29-38.

Физика конденсированного состояния

80. Parshin P. P. et al. Atomic Dynamics of Diamond at a “Negative” Pressure //JETP Letters. – 2019. – T. 110. – №. 1. – C. 37-40.
81. Stefanovsky S. V. et al. The structure of rhenium-containing sodium alumino (iron) phosphate glasses //International Journal of Applied Glass Science. – 2019. – T. 10. – №. 4. – C. 479-487.
82. Akimova O. V., Veligzhanin A. A. Effect of Annealing on the Structure of Metallic Diffusive Membrane Filters on the Base of Palladium //Physics of Metals and Metallography. – 2019. – T. 120. – №. 10. – C. 962-968.
83. Domoroshchina E. N. et al. Relationship between the Surface Composition of Titanium Oxide (IV)/Zeolite Nanocomposites and Their Photocatalytic and Adsorption Properties: X-ray Photoelectron Spectroscopy Data //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – T. 13. – №. 1. – C. 117-123.
84. Valeev R. G. et al. Nanostructured ZnS: Cu (Mn) Coatings on the Surface of Porous Anodic Alumina for Optical Applications //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – T. 13. – №. 1. – C. 92-100.
85. Zhaketov V. D. et al. Magnetic and Superconducting Properties of the Heterogeneous Layered Structures $V/Fe_{0.7}V_{0.3}/V/Fe_{0.7}V_{0.3}/Nb$ and $Nb/Ni_{0.65(0.81)}Cu_{0.35(0.19)}$ //Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2019. – T. 129. – №. 2. – C. 258-276.

86. Marikhin V. A. et al. Study of Kinetics of Solid Phase Transition in Tetracosane C_{2450} by High-Resolution Synchrotron X-Ray Powder Diffraction //Physics of the Solid State. – 2019. – T. 61. – №. 6. – C. 1128-1135.
87. Goryachevskiy A. V. et al. Experimental Observation of Island-Type Films of $C_{60}F_{18}$ Polar Molecules on the Surface of Highly Oriented Pyrolytic Graphite //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – T. 13. – №. 5. – C. 934-940.
88. Kvashnina K. O. et al. A Novel Metastable Pentavalent Plutonium Solid Phase on the Pathway from Aqueous Plutonium (VI) to PuO_2 Nanoparticles //Angewandte Chemie International Edition. – 2019. – T. 58. – №. 49. – C. 17558-17562.
89. Plakhova T. V. et al. Size Effects in Nanocrystalline Thoria //The Journal of Physical Chemistry C. – 2019. – T. 123. – №. 37. – C. 23167-23176.
90. Spasov D. D. et al. On the Influence of Composition and Structure of Carbon-Supported Pt-SnO₂ Hetero-Clusters onto Their Electrocatalytic Activity and Durability in PEMFC //Catalysts. – 2019. – T. 9. – №. 10. – C. 803.
91. Frentrop R. et al. In-depth structural analysis of swift heavy ion irradiation in $KY(WO_4)_2$ for the fabrication of planar optical waveguides //Optical materials express. – 2019. – T. 9. – №. 12. – C. 4796-4810.
92. Kazak N. V. et al. Study of mixed-valence Mn_2BO_4 using XRD, XPS and XAFS spectroscopies //Physica B: Condensed Matter. – 2019. – T. 560. – C. 228-235.
93. Rogachev S. O. et al. Structure and mechanical properties of $Al^{100}Ca$ alloys processed by severe plastic deformation //Materials Science and Engineering: A. 2019. T. 767. C. 138410.
94. Anokhin E. O. et al. Silica coated hard-magnetic strontium hexaferrite nanoparticles //Advanced Powder Technology. – 2019. – T. 30. – №. 9. – C. 1976-1984.
95. Sundeev R. V. et al. The effect of changes in the local atomic structure on the magnetic properties of amorphous iron-based alloys deformed by high-pressure torsion at different temperatures //Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – T. 797. – C. 622-629.
96. Chernyshev A. V. et al. Ion-depended photochromism of oxadiazole containing spiropyrans //Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. – 2019. – T. 378. – C. 201-210.
97. Brzhezinskaya M. et al. Characterization of amorphous hydrocarbon CD x films (x=0.5) for energy storage applications //Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2019. – C. 1-6.
98. Subbotin I. A. et al. The influence of microstructure on perpendicular magnetic anisotropy in Co/Dy periodic multilayer systems //Physica B: Condensed Matter. – 2019. – T. 573. – C. 28-35.
99. Andreeva M. A., Baulin R. A., Repchenko Y. L. Standing wave approach in the theory of X-ray magnetic reflectivity //Journal of synchrotron radiation. – 2019. – T. 26. – №. 2.
100. Suyasova M. V. et al. Proton Spin Relaxation in Aqueous Solutions of Self-assembling Gadolinium Endofullerenols //Applied Magnetic Resonance. – 2019. – T. 50. – №. 10. – C. 1163-1175.
101. Valiev E. Z. et al. Neutron Diffraction Studies of the Transformation of Magnetic and Domain Structures upon Spin-Reorientation Transition in the Tm_2Fe_{18} Ferrimagnet //Physics of Metals and Metallography. – 2019. – T. 120. – №. 4. – C. 313-319.

Культурное наследие

102. Antipin A. M. et al. X-Ray, Synchrotron and Mass-Spectrometric Methods for the Study of Ceramic Objects of Cultural Heritage //Crystallography Reports. – 2019. – T. 64. – №. 3. – C. 515-523.
103. Sozontov E. A. et al. Ancient Parchments: Structural Diagnostics and Visualization of Textual Fragments of Manuscripts—A Natural-Science Approach //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – T. 13. – №. 2. – C. 366-370.

Методики и инструменты

104. Snegirev N. et al. Ferro-gallium borate single crystals for nuclear resonance synchrotron experiments //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2019. – Т. 525. – №. 1. – С. 012048.
105. Borisov M. M. et al. Polarization and Interference Effects in the Resonant Diffraction of Synchrotron Radiation //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – Т. 13. – №. 5. – С. 925-933.
106. Kohn V. G. et al. Experimental Study of Two-Beam X-Ray Diffractometry Using Synchrotron Radiation //Crystallography Reports. – 2019. – Т. 64. – №. 1. – С. 24-29.
107. Seregin A. Y. et al. Experimental and Theoretical Study of the Triple-Crystal High-Resolution X-Ray Diffraction Scheme in Reciprocal Space Mapping Technique //Crystallography Reports. – 2019. – Т. 64. – №. 4. – С. 545-552.
108. Mkrtchyan A. R. et al. Distribution of Deformations in the Oscillating X-Ray Acoustic Element Based on the X-Cut Quartz Crystal //Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences). – 2019. – Т. 54. – №. 2. – С. 210-218.
109. Peters G. S. et al. The small-angle X-ray scattering beamline BioMUR at the Kurchatov synchrotron radiation source //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2019. – Т. 945. – С. 162616.
110. Kulikov A. et al. LiNbO₃-based bimorph piezoactuator for fast X-ray experiments: Static and quasistatic modes //Sensors and Actuators A: Physical. – 2019. – Т. 291. – С. 68-74.
111. Marchenkov N. et al. LiNbO₃-based bimorph piezoactuator for fast X-Ray experiments: Resonant mode //Sensors and Actuators A: Physical. – 2019. – Т. 293. – С. 48-55.
112. Somenkov V. A. et al. On the Complex Radiation Diagnostics Facility “Dragon” //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – Т. 13. – №. 5. – С. 870-876.
113. Elievich Y. A. et al. Multiple-Wave Interaction of X-Rays in a Paratellurite Crystal under Excitation of Ultrasonic Vibrations //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – Т. 13. – №. 4. – С. 570-577.
114. Litvin V. S. et al. Neutron Diffraction and Spectrometry at the RADEX Pulsed Neutron Source of the Institute for Nuclear Research, Russian Academy of Sciences //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – Т. 13. – №. 2. – С. 188-194.
115. Mikula P. et al. Dispersive double bent crystal monochromators Si (111)+ Si (311) and Si (111)+ Si (400) with a strongly asymmetric diffraction geometry of the analyzer for powder diffractometry //Powder Diffraction. – 2019. – Т. 34. – №. S1. – С. S18-S22.
116. Karpov I. D., Em V. T., Sumin V. V. Measuring Residual Stresses in Vamas International Calibration Block with the Stress Diffractometer of Ir-8 Reactor //Russian Journal of Nondestructive Testing. – 2019. – Т. 55. – №. 4. – С. 328-333.
117. Peters G. S. et al. The small-angle X-ray scattering beamline BioMUR at the Kurchatov synchrotron radiation source //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2019. – Т. 945. – С. 162616.



Часть IV

Приложения. Справочные материалы

Экспериментальные установки ККСНИ

План экспериментального зала синхротрона

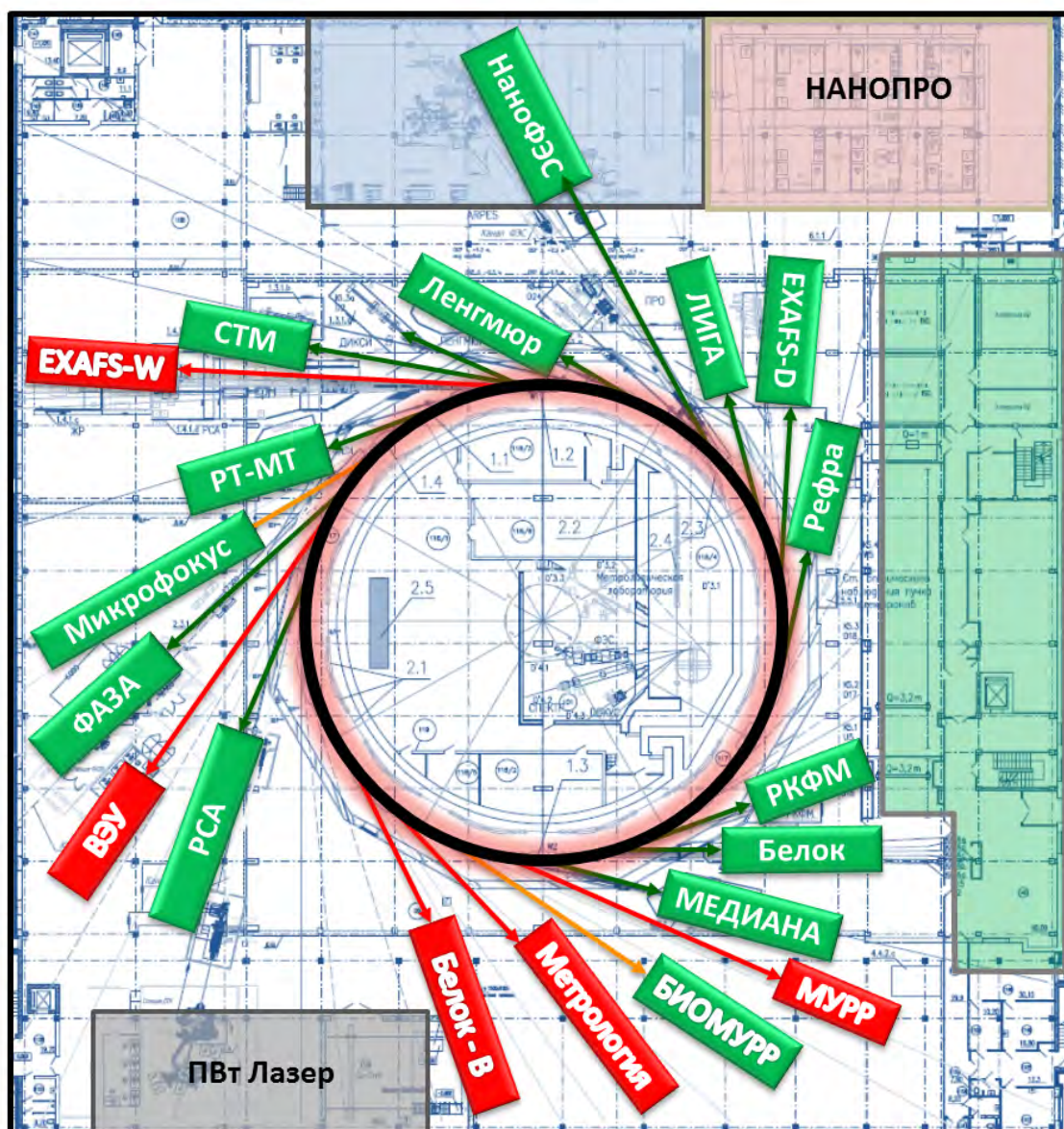


Рис. 1. План экспериментального зала синхротронного источника. Размещение экспериментальных станций. (зеленым- станции введенные в эксплуатацию, красным- строящиеся)

Перечень экспериментальных станций КИСИ

Таблица 1. Рассеяние и дифракция

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
1.2.ЛЕНГМЮР	Рентгеновская рефлектометрия (XR); Стоячие рентгеновские волны (XSW); Дифракция в скользящей геометрии (GID); Рентгеновская флуоресценция в полном внешнем отражении (TXRF)/ Жидкостной гониометр с рабочим угловым диапазоном $0.3 \text{ \AA}^{-1}$; Ленгмюровская ванна для формирования образцов	5–30 кэВ, $\Delta E/E \sim 4 \cdot 10^{-4}$
2.3. ФАЗА	Стоячие рентгеновские волны; Дифракция высокого разрешения; Многоволновая дифракция; Поверхностная дифракция; Рентгеноакустика; Рентгеновская голография; Резонансная дифракция; Рефлектометрия; Диффузное рассеяние	3,5–40 кэВ, $\Delta E/E \sim 10^{-4} \div 4 \cdot 10^{-3}$
2.6. РСА	Рентгеноструктурный анализ (РСА) монокристаллических неорганических объектов; Прецизионная порошковая дифракция с двумерным сканирующим детектором	5–40 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-3}$ Размер кристаллов: 5-400 мкм Разрешение: до $0.65 \text{ \AA}$
3.5.БиоМУР	Малоугловое рентгеновское рассеяние (SAX), в т.ч. в динамике; Диапазон измеряемых q от $0,03$ до 30 нм^{-1}	8.58 кэВ (0.1445 нм) $\Delta E/E \sim 1 \cdot 10^{-3}$
4.2. МУР	Малоугловое рассеяние. Диапазон температур образца -195°C , $\div 600^{\circ}\text{C}$	5–20 кэВ, $\Delta E/E \sim 8 \cdot 10^{-4}$ Размер пучка $1.4 \times 0.3 \text{ мм}$.
4.4e. БЕЛОК	РСА макромолекулярных кристаллов с большими параметрами ячейки; Монокристалльная дифрактометрия (классический РСА); Порошковая дифрактометрия	5–20 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-3}$
4.6. РКФМ	Двух-трёхкристалльная дифрактометрия; Многоволновая дифракция; Картирование обратного пространства; Рефлектометрия; Стоячие рентгеновские волны; Рентгенофлуоресцентный анализ; Рентгеноакустика	Моно Si(111) и Si(311) 5–40 кэВ, $\Delta E/E \sim 1 \cdot 10^{-3}$ Размер пучка max: $4.0 \times 60 \text{ мм}$; min: $10 \times 10 \text{ мкм}$

Таблица 2. Спектроскопия

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
1.3.6 СТМ	EXAFS/XANES-спектроскопия, порошковая дифракция	5–30 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-4}$
1.4 EXAFS-W	Спектроскопия EXAFS, в т.ч. на высоких энергиях	4–60 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-4}$
2.2. МикроФокус	Рентгенофлуоресцентная спектроскопия, порошковая дифракция	5–30 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-4}$
5.6. РЕФРА	EXAFS-спектроскопия во флуоресцентной моде	5–30 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-4}$
6.2. EXAFS-D	EXAFS-спектроскопия в дисперсионной моде, дифракция Дебая-Шеррера	5–30 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-4}$
6.5.НАНО-ФЭС	Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES); Околокраевое рентгеновское поглощение (NEXAFS); SPM(STM+AFM) микроскопия	25–1500 эВ, $\Delta E/E \sim 4 \cdot 10^{-4}$
4.3. ЛОКУС	Оптические исследования люминесценции, пропускания, отражения	3,5–20 эВ, $\Delta E/E \sim 5 \cdot 10^{-3}$

Таблица 3. Визуализация

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
1.6. РТ-МТ	Микротомография, интроскопия и топография	5–30 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-4}$ Ø15 мм, 15×15×15 мкм Ø1,5 мм, 2.5×2.5×2.5 мкм
4.3.МЕДИАНА	Микротомография, фазовый контраст, топография	10–80 кэВ, $\Delta E/E \sim 2 \cdot 10^{-4}$ 35 × 5мм, 9×9×9 мкм
6.3. ЛИГА	Томография на белом пучке	50–80 кэВ, $\Delta E/E \sim 30\%$ 85 × 3мм, 25×25×25 мкм

План экспериментального зала реактора

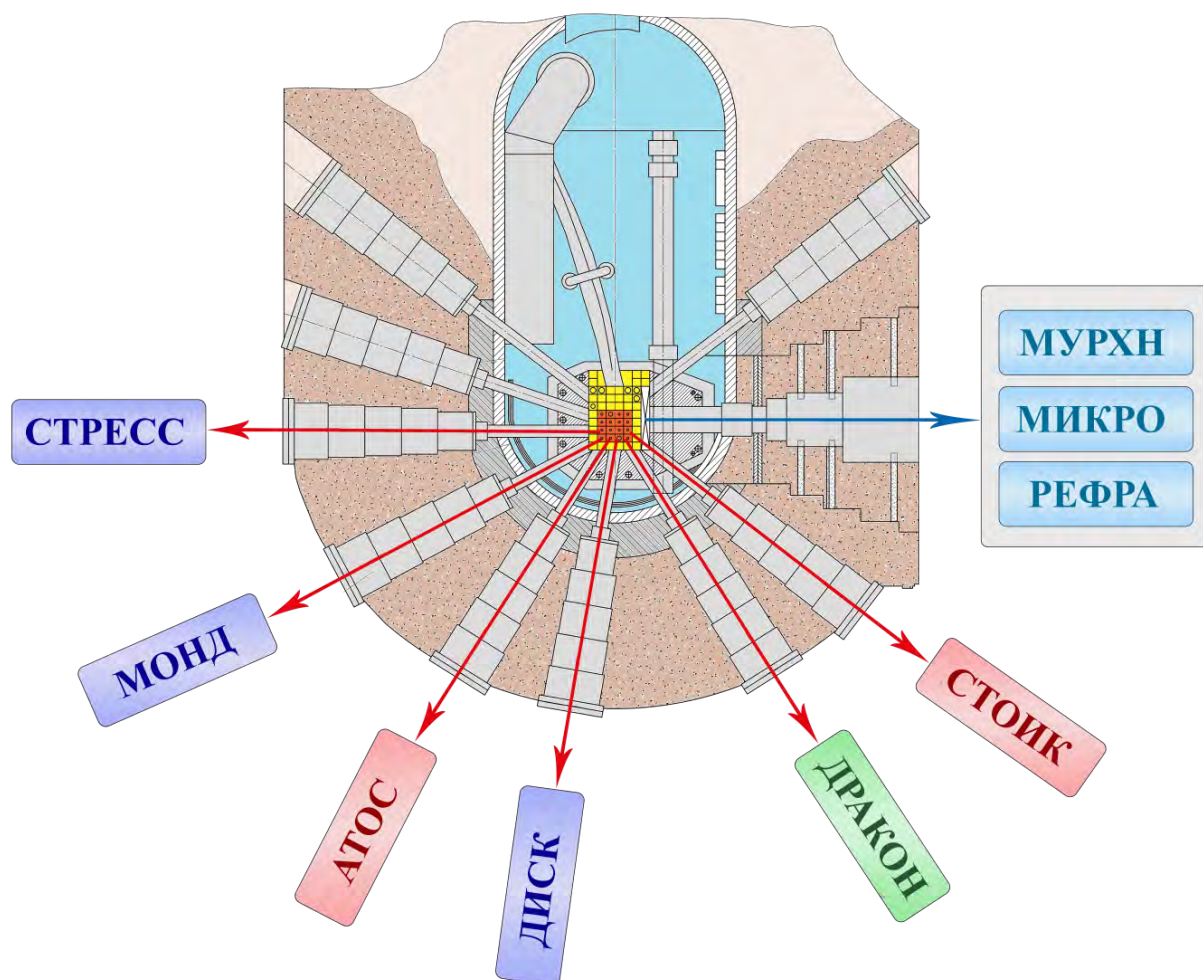


Рис. 2. Схема расположения станций УНУ НИК ИР-8 на поперечном разрезе реактора

Перечень экспериментальных установок на каналах ИР-8

Таблица 4. Дифракция

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
ГЭК 3 СТРЕСС	Стресс- дифрактометрия	Стресс-дифрактометр с двухкоординатным газоразрядным детектором	1,56 Å $\Delta d/d = 0.3\%$
ГЭК 4 МОНД	Монокристалльная дифракция	Пятикружный монокристалльный дифрактометр	1 – 2,6 Å $\Delta E/E = 0.01$
ГЭК 6 ДИСК	Порошковая ди- фракция	Порошковый дифрактометр с кольцевым детектором. Окру- жение образца: криостат, печь, камеры высокого давления	1 – 2,5 Å $\Delta d/d = 2\%$

Таблица 5. Рассеяние

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
ГЭК 5 АТОС	Неупругое когерентное рассеяние на монокристаллических образцах	Трёхосный кристаллический спектрометр	1,526 Å $\Delta E/E = 0.02$
ГЭК 9 СТОИК	Малоугловое рассеяние	Двухкристальный спектрометр на идеальных кристаллах	0,8 – 2,5 Å $\Delta E/E = 10\%$

Таблица 6. Визуализация

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
ГЭК 8 ДРАКОН	Абсорбционная радиография и томография	Автоматизированный томограф	1 – 3 Å

Таблица 7. Развитие экспериментальной базы

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ	ИСТОЧНИК
ГЭК 10 МУРХН	Малоугловое рассеяние холодных нейтронов	Спектрометр на нейтроноводе	Источник холодных нейтронов
ГЭК 10 МИКРО	Порошковая дифракция холодных нейтронов	Дифрактометр на нейтроноводе	Источник холодных нейтронов
ГЭК 10 РЕФРА	Рефрактометрия поляризованных нейтронов	Рефрактометр на нейтроноводе	Источник холодных нейтронов

Лабораторные рентгеновские установки



Рентгеновский дифрактометр BRUKER D8 ADVANCE

Прибор позволяет решать классические задачи порошковой дифракции: качественный и количественный фазовый анализ; определение размеров кристаллитов; уточнение структуры.

Особенности прибора: вертикальный гониометр; возможность съёмки с использованием зеркала Гёбеля (параболическое многослойное интерференционное зеркало).

Рентгенофлуоресцентный спектрометр BRUKER S4 PIONEER

Безэталонный многоэлементный анализ порошковых проб, прессованных таблеток, сплавленных дисков различных материалов, жидкостей, минералов, руд, керамики, металлов, стёкол, полимеров, углеводов, для исследований малых и нестандартных проб, для анализа микропримесей.

Возможности: анализируемые элементы от углерода до урана; нижние пределы концентрации обнаружения элемента от 10^{-4} до 10^{-2} %; относительная ошибка — 1—10% в зависимости от элемента; возможность измерения в газовой атмосфере гелия или азота для анализа жидкостей и сыпучих порошков.

Рентгеновский дифрактометр BRUKER D8 DISCOVER

Прибор позволяет решать следующие задачи: рентгеноструктурный анализ; качественный и количественный фазовый анализ; рентгенодифракционные и рентгенорефлектометрические измерения различных параметров (толщин аморфных и кристаллических слоёв, параметров кристаллических решёток, дефектов в кристаллических решётках, напряжений и релаксаций, химического состава, шероховатости поверхности и гетерограниц, ориентаций подложек и эпитаксиальных слоёв и др.) тонких плёнок, полупроводниковых и магнитных материалов, для решения задач метрологии.

Возможности: горизонтальный гониометр; геометрия съёмки $\theta/2\theta$: $-110^\circ < 2\theta < 168^\circ$, $-180^\circ < \theta < 360^\circ$; наименьший шаг 0.0001° ; воспроизводимость $\pm 0.0001^\circ$; максимальная угловая скорость $30^\circ/\text{с}$.

Рентгеновский дифрактометр RIGAKU SMARTLAB

Многоцелевой полностью автоматический рентгеновский дифрактометр оборудованный вертикальным гониометром высокой точности с горизонтальным расположением исследуемого образца. В состав оборудования входит рентгеновский генератор высокой интенсивности с вращающимся анодом 9 кВт.

Предназначен для исследования различных материалов: порошки, массивные материалы, тонкие плёнки.

Возможности: идентификация фазы кристаллических структур, определение размера кристаллитов, определение совершенства кристаллической структуры, ориентации и структуры тонких плёнок, распределения размеров наночастиц и пор; установление параметров многослойных структур (толщина, плотность, шероховатость поверхности и гетерограниц), проведение одновременного рентгеноструктурного и калориметрического анализа.

Комбинированная система мало- и широкоугольного рассеяния рентгеновского излучения HECUS S3-MICRO

Применяется для изучения твёрдых образцов, гелей, макромолекулярных растворов, полимеров, тонких плёнок, а также для решения задач биомедицины. Позволяет решать задачи построения моделей биомacroмолекул, определения структурных параметров пор (распределения по размерам, формы) в различных веществах, восстановления структуры кластеров в частично упорядоченных системах, определения структурных параметров вкраплений в твёрдой матрице и другое.

Рентгенофлуоресцентный энергодисперсионный спектрометр с ПВО BRUKER PICOFOX

Рентгенофлуоресцентный анализ с полным внешним отражением (РФА ПВО или TXRF) является особым энергодисперсионным методом, так как имеет специальную геометрию расположения источника возбуждения и детектора флуоресцентного излучения. Узкий рентгеновский пучок падает на подложку с образцом под малым углом ($0.3 \dots 0.6^\circ$) и отражается поверхностью под действием эффекта полного внешнего отражения. Использование такого принципа позволяет уменьшить эффекты рассеяния, а также расположить детектор очень близко к пробе, что, в свою очередь, повышает эффективность регистрации флуоресцентного излучения. В результате чувствительность прибора возрастает на несколько порядков (до долей ppb).



Редакционная коллегия:

А.В. Белушкин, П.А. Борисова, А.А. Велигжанин, А.А. Гогин,
Н.В. Марченков, Э.М. Пашаев, К.М. Подурец, Р.А. Сенин, С.Н. Якунин

**Курчатовский комплекс
синхротронно-нейтронных исследований.
Годовой отчет
2019**

Печать цифровая. Тираж 20 экз . Заказ №

Вёрстка в пакете L^AT_EX

Отпечатано в НИЦ «Курчатовский институт»
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д.1
© НИЦ «Курчатовский институт» 2020