

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
"КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ"

КУРЧАТОВСКИЙ КОМПЛЕКС
СИНХРОТРОННО-НЕЙТРОННЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ГОДОВОЙ ОТЧЁТ

за 2020 год

www.kcsni.nrcki.ru

Москва

Оглавление

Введение	5
I Общие сведения о работе ККСНИ по заявкам. Уникальные научные установки «КИСИ-Курчатов» и НИК ИР-8	7
1 Общие сведения о текущей работе комплекса	8
1.1. Работа источника синхротронного излучения (КИСИ) в 2020 году	8
1.2. Работа исследовательского реактора ИР-8	8
1.3. Работа УНУ КИСИ по заявкам пользователей в 2020 году	9
1.4. Работа УНУ НИК ИР-8 по заявкам пользователей в 2020 году	12
2 Развитие экспериментальной базы	14
2.1. Развитие экспериментальной базы КИСИ	14
2.2. Развитие экспериментальной базы ИР-8	20
II Научная деятельность комплекса	21
3 Избранные научные результаты	22
4 Концепция модернизации накопительного кольца и инжекционного комплекса источника КИСИ	45
4.1. Введение	45
4.1.1. Ожидаемые параметры синхротрона КИСИ после модернизации . . .	47
4.2. Размеры источника после модернизации	49
4.3. План развития ускорительно-накопительного комплекса	50
4.4. Новый инжекционный комплекс	50
4.4.1. Линейный ускоритель	50
4.4.2. Бустерный синхротрон источника СИ	54
4.5. Параметры источников на базе вставных устройств до и после модернизации	60
5 Концепция развития экспериментальных станций модернизированного синхротрона «КИСИ-Курчатов»	62
5.1. Перечень экспериментальных станций синхротрона «КИСИ-Курчатов» после модернизации	62
5.2. Вводимые в строй станции	64
5.2.1. Станция МИКРОФОКУС	64

5.2.2.	Станция ПРО (прецизионной рентгеновской оптики)	65
5.2.3.	Станция EXAFS-W	66
5.2.4.	Станция ВЭУ (Вещество в экстремальных условиях)	68
5.2.5.	Станция МУР (малоуглового рассеяния)	69
5.2.6.	Станция БЕЛОК-2(W)	70
5.3.	Проектируемые станции	72
5.3.1.	Станция Метрология	72
5.3.2.	Станция СИТОМ	73
5.3.3.	Станция НКР (нанокогерентности)	74
6	Подготовка проекта синхротрона для источника четвертого поколения	
	СИЛА	75
6.1.	Структура накопительного кольца	75
6.2.	Выбор схемы инжекции	80
6.2.1.	Стандартная инжекция «off-axis»	80
6.2.2.	Усовершенствованные схемы инжекции	82
6.3.	Экспериментальные станции комплекса СИЛА	84
6.3.1.	Уточнение перечня станций первой очереди	84
6.3.2.	Станция нанодифракции. Назначение	86
6.3.3.	Станция нанодифракции. Оптическая схема	87
6.3.4.	Станция нанодифракции. Экспериментальное оборудование	89
6.3.5.	Станция нанодифракции. Кадровые потребности	90
7	Список публикаций сотрудников комплекса	92
III	Приложения.	
	Справочные материалы	101

Введение

В настоящее время проведение экспериментов на установках класса «мегасайенс» – источниках синхротронного излучения и нейтронов – является важнейшим и неотъемлемым этапом создания самых передовых прикладных технологий в таких критически важных областях, как разработка новых лекарств, инновационных конструкционных функциональных материалов, нефтехимических производств и др.



В Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований (ККСНИ) на одной площадке работают специализированный источник синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» и исследовательский реактор нейтронов ИР-8, что делает НИЦ «Курчатовский институт» одним из немногих мест в мире, где возможности комплементарного применения синхротронного излучения и нейтронов для исследования широкого круга объектов органически дополняют друг друга.

В 2020 году на Курчатовском источнике синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» были проведены исследования по 82 заявкам от 31 научных организаций, включая научно-исследовательские институты и высшие учебные заведения. Пандемия COVID-19 и карантинные ограничения существенно повлияли на график работы «КИСИ-Курчатов». Реактор ИР-8 оказался в ещё более сложных условиях: общее время работы с учетом остановки на карантин составило 183 часа, за которые были выполнены 5 заявок. За 2020 год сотрудниками ККСНИ было опубликовано 134 научных статьи в рецензируемых журналах. Тематики исследований, проводимых в 2020 году на исследовательской инфраструктуре ККСНИ, охватывают широкий спектр научных направлений: медицина и структурная биология, химия, физика конденсированного состояния, материаловедение, изучение объектов

культурного наследия, экология.

В 2020 году «КИСИ-Курчатов» второй год подряд участвовал в конкурсе Российского научного фонда по мероприятию «Проведение исследований на базе существующей научной инфраструктуры мирового уровня». На конкурс различными организациями была подана 51 заявка, предполагающая проведение исследований на Курчатовском синхротроне (для сравнения, в рамках конкурса 2019 года было подано 25 заявок). Таким образом, «КИСИ-Курчатов» второй год подряд стал самой востребованной исследовательской установкой России в рамках этого конкурса РНФ. По результатам конкурса к 10 проектам, реализуемым на «КИСИ-Курчатов» с 2019 года, добавилось еще 10 новых проектов – победителей конкурса в 2020 году.

Помимо проведения исследований на мегаустановках НИЦ «Курчатовский институт», коллектив ККСНИ в 2020 году продолжил работу над проектом глубокой модернизации «КИСИ-Курчатов», запланированной на 2022 – 2024 годы в рамках Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы. В рамках этого направления были выполнены расчёты новой структуры накопительного кольца, а также структуры бустерного синхротрона, линейного ускорителя, результаты которых легли в основу научной концепции ускорительно-накопительного комплекса модернизированного «КИСИ-Курчатов» и на базе которых будут разработаны техническое задание и исходные данные для проектирования будущей установки.

Сотрудниками ККСНИ также продолжается разработка научной концепции синхротронного комплекса 4-го поколения с рентгеновским лазером на свободных электронах СИЛА, который планируется создать в г. Протвино (Московская область). Проект разрабатывается, в том числе, при международном участии: в рамках стартовавшего в 2020 году международного проекта CREMLINplus совместно с сотрудниками Европейского центра синхротронных исследований ESRF (Франция) ведутся работы по расчёту магнитной структуры накопительного кольца комплекса СИЛА. Силами сотрудников ККСНИ при участии коллег из DESY (Германия) был разработан концептуальный проект первой экспериментальной станции – станции нанодифракции.

Коллектив ККСНИ открыт для совместного проведения научных исследований и надеется, что круг научных и прикладных задач, решаемых на мегаустановках НИЦ «Курчатовский институт», будет и в дальнейшем расширяться.

Часть I

Общие сведения о работе
ККСНИ по заявкам.

Уникальные научные установки
«КИСИ-Курчатов» и
НИК ИР-8

Глава 1

Общие сведения о текущей работе комплекса

1.1. Работа источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» в 2020 году

Таблица 1.1. Статистические данные о работе ускорителя

Полное время работы на пользователей (согласно календарному плану работы УНК (ускорительно-накопительный комплекс))	2618 ч
Чистое запланированное время работы на пользователей (без учёта времени на настройку и перенакопление $\sim 15\%$)	2225 ч
Фактическое время работы на эксперимент (в машине имеется пучок при $E=2.5$ ГэВ)	1202 ч
Доля от запланированного	54%
Суммарная наработка всех каналов вывода СИ (фиксируется по факту открытия приёмников СИ)	6755 ч
Среднее за год количество работающих каналов вывода СИ	5.6

1.2. Работа исследовательского реактора ИР-8 в 2020 году

Таблица 1.2. Статистические данные о работе реактора ИР-8

Полное время работы реактора ИР-8	247 ч
Фактическое время работы на эксперимент	198 ч
Суммарная наработка всех горизонтальных каналов ИР-8 по заявкам	175 ч
Количество работающих на пользователей горизонтальных каналов	4

1.3. Работа УНУ КИСИ по заявкам пользователей в 2020 году

По числу проводимых ежегодно экспериментов ККСНИ – уникальный комплекс в Российской Федерации. Однако ККСНИ не только предоставляет свое оборудование другим организациям, значительную часть пучкового времени составили заявки на исследование по планам работы НИЦ «Курчатовский институт».

Несмотря на сложную эпидемиологическую обстановку и вызванные ей незапланированные остановки УНК и реактора ИР-8 в апреле–мае и декабре, в 2020 году обеспечена работа экспериментальных установок на Курчатовском источнике синхротронного излучения и источнике нейтронов ИР-8, в том числе по заявкам сторонних пользователей.

На УНУ КИСИ в 2020 году были реализованы эксперименты по 83 заявкам от 31 организации-пользователя. География

поступивших заявок довольно традиционна для УНУ КИСИ. Значительная часть организаций-пользователей сосредоточена в Москве, поэтому большинство заявок, 62, поступило от 17 московских организаций. Также выделяются по количеству поступивших заявок организации Красноярска и Ростова-на-Дону – по 4 заявки. Всего за 2020 год на 14 станциях УНУ КИСИ на проведение измерений по заявкам затрачено 3000 часов. Наиболее задействованными по пучковому времени были станции «Структурное материаловедение» – 954 часа и «Белок» – 551 час, в сумме давая 50% от всего времени, затрачиваемого на работу по заявкам. По выполненным заявкам наиболее востребованными были станции «Структурное материаловедение» – 23 заявки, «Белок» – 21 заявка и «БиоМУР» – 15 заявок.

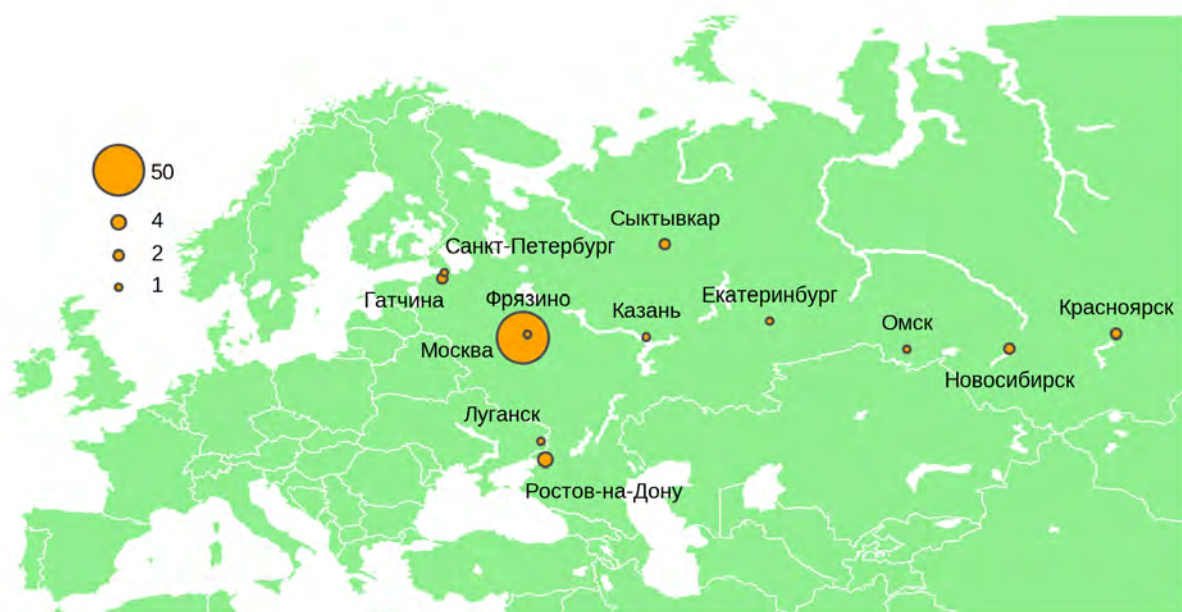


Рис. 1.1. География заявок пользователей. Диаметр кружка соответствует количеству поступивших заявок



Рис. 1.2. Выполненные заявки по ведомственной принадлежности: а) количество выполненных заявок, б) время(часы), затраченное на исполнение заявок

Таблица 1.3. Организации-пользователи синхротронного источника

№	Название организации	Затрачено часов	Выполнено заявок
1.	Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»	800.8	19
2.	Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН	371.1	9
3.	Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова	293.0	7
4.	Химический факультет Московского государственного университета	183.2	3
5.	Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН	155.7	5
6.	Южный федеральный университет	146.8	4
7.	МИРЭА – Российский Технологический Университет	107.9	3
8.	Палеонтологический институт им. А.А. Борисяка РАН	92.6	3
9.	Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН	91.5	1
10.	Институт физики СО РАН	79.1	3
11.	Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН	75.0	1
12.	Институт общей и неорганической химии РАН	61.7	5
13.	Институт химии Коми НЦ УрО РАН	60.7	1
14.	Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И.П.Бардина	49.3	2
15.	Казанский федеральный университет	44.2	1
16.	НТО «Лазерные технологии»	40.0	1
17.	Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН	40.0	1

Таблица 1.3. Организации-пользователи синхротронного источника

№	Название организации	Затрачено часов	Выполнено заявок
18.	Институт проблем переработки углеводородов СО РАН	36.4	1
19.	Российский университет дружбы народов	33.8	1
20.	Сколковский институт науки и технологий	32.0	1
21.	Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»	31.0	2
22.	Институт археологии РАН	30.5	1
23.	Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН	29.8	1
24.	Луганский национальный университет им. Т. Шевченко	29.5	1
25.	Института молекулярной биологии им. В.А.Энгельгардта РАН	22.2	1
26.	Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук	21.2	1
27.	Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН	21.0	1
28.	Институт катализа СО РАН	10.0	1
29.	Институт химических реактивов и особо чистых химических веществ Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»	4.1	1
30.	Сибирский федеральный университет	1.5	1
31.	Институт геологии Коми НЦ УрО РАН	0.4	1

1.4. Работа УНУ НИК ИР-8 по заявкам пользователей в 2020 году

Особое место среди действующих исследовательских ядерных установок занимает реактор ИР-8. Он самый «долгоживущий» действующий исследовательский реактор в России, а особенности компоновки его активной зоны обеспечивают наилучшие для реакторов такого класса «среднепоточные» нейтронные параметры как в активной зоне, так и в отражателе (плотность потока $10^{13} \dots 10^{14}$ н/(см²·с)), что делает его одним из самых современных. В настоящее время исследовательский реактор ИР-8 является источником тепловых нейтронов для созданного на его базе нейтронного исследовательского комплекса (НИК ИР-8). В НИК ИР-8 проводят экспериментальные исследования с применением рассеяния нейтронов для различных областей науки и техники, в том числе для решения следующих фундаментальных и прикладных задач:

- исследование кристаллической и магнитной структуры твердых тел;
- исследование конденсированных веществ в экстремальных условиях;
- исследование напряженно-деформированного состояния материалов;
- исследование микроструктуры материалов;
- исследование внутреннего строения объектов методами нейтронной радиографии и томографии;
- исследование атомной и магнитной динамики твердых тел.

В 2020 году заявки принимали на 4 экспериментальные станции, а именно: «СТРЕСС», предназначенной для получения прямой информации о деформациях и напряжениях внутри массивных поликристаллических объектов методом нейтронной стресс-дифрактометрии; «ДИСК», предназначенной для проведения исследований атомной и магнитной структур порошковых материалов в экстремальных условиях методом нейтронной дифракции; «ДРА-

КОН», предназначенной для проведения диагностики внутреннего строения габаритных объектов методами нейтронной радиографии и томографии; «СТОИК», предназначенной для исследования микронеоднородностей в конденсированном веществе методом нейтронного ультрамалоуглового рассеяния.

Фактическое время работы реактора в 2020 году на эксперимент составило 198 часов, в остальное время длительных запланированных остановок ИР-8 выполнены подготовительные работы к монтажу источника холодных нейтронов, работы по демонтажу шибберного устройства горизонтального экспериментального канала (ГЭК) № 6 и расположенной на канале станции «ДИСК», завершены работы по модернизации и сборке биологической защиты станции «СТРЕСС» после замены шибберного устройства ГЭК № 3 в 2019 г.

В результате за 2020 г. полностью удалось выполнить только заявки, поступившие на станцию «ДРАКОН» (5 заявок). Пучковое время на других станциях НИК ИР-8 было затрачено на проведение нейтронных экспериментов, результаты которых представлены в отчетных материалах по научно-исследовательским работам отдела нейтронных экспериментальных станций. В соответствии с планом исследований на 2020 г. были реализованы следующие работы: исследование фазовых превращений при высоких давлениях и температурах в фуллеренах с малыми добавками металла и без добавок методом дифракции нейтронов; исследование локализации атомов водорода в гидридах интерметаллических соединений методом дифракции нейтронов; исследование распределения внутренних напряжений в тонкостенных модельных образцах из стали методом стресс-дифрактометрии; исследование древнерусских предметов художественной цветной металлообработки методом нейтронной томографии.

Таблица 1.4. Организации-пользователи нейтронного источника

№	Название организации	Затрачено часов	Выполнено заявок
1.	Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»	72	2
2.	Институт археологии РАН	90	2
3.	Палеонтологический институт РАН	13	1

Глава 2

Развитие экспериментальной базы

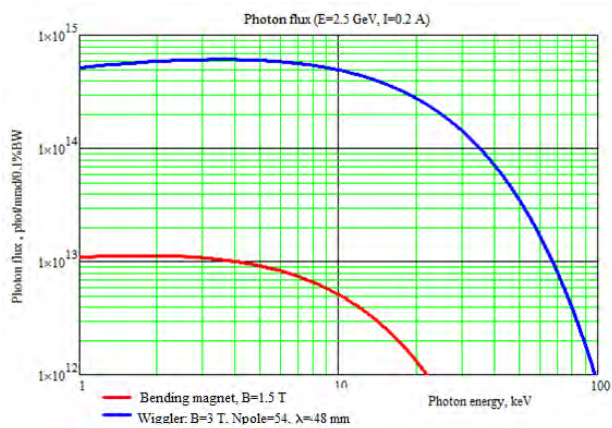
2.1. Развитие экспериментальной базы КИСИ

Монтаж сверхпроводящих вигглеров

В 2020 г. синхротрон был оснащён двумя новыми источниками излучения высокой яркости – сверхпроводящими вигглерами. Вигглеры позволяют более чем на два порядка поднять поток фотонов на образце и сократить время измерений. Вигглеры предназначены для станций ВЭУ и Белок-2. Параметры приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Параметры вигглеров

Параметры	
Рабочее магнитное поле (max)	3; 3.6 Тл
Период	48 мм
Число основных полюсов	50
Ток в полюсах	400+370 А
Излучаемая мощность (B=3 Тл, I=0.2 А, E=2.5 ГэВ)	10 кВт
Расходимость по горизонтали	± 3 мрад
Критическая энергия фотонов	~ 12.5 кэВ
Запасённая энергия	~ 20 кДж
Подъём тока	< 5 мин
Нестабильность поля	10^{-4}



(а)



(б)

Рис. 2.1. (а) сравнение потоков из поворотного магнита и вигглера с полем 3 Тл, (б) вигглер в тоннеле накопителя

Модернизация станции ПРО

На экспериментальной станции ПРО собран экспериментальный стенд на основе адаптивных элементов рентгеновской оптики для реализации метода быстрого EXAFS (quick EXAFS). Он предназначен для проведения экспериментов с использованием методики спектроскопии поглощения рентгеновских лучей. Ключевым элементом стенда является адаптивный элемент рентгеновской оптики (АЭРО) – изгибный актуатор с прикрепленным к его краю совершенным кристаллом кремния (рис. 2.2).

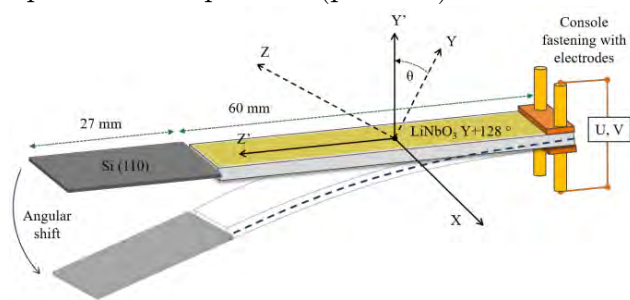


Рис. 2.2. Устройство рентгенооптического изгибного элемента, закрепленного в держателе

В ряде работ показана возможность модуляции спектральных и пространственных характеристик рентгеновского пучка с высокой частотой (≈ 250 Гц). Изгибный актуатор является основой для однокристалльного

монохроматора, используемого для быстрой модуляции энергии монохроматизированного рентгеновского пучка в диапазоне ~ 500 эВ. Быстрый монохроматор будет использован для записи спектров поглощения с временным разрешением лучше 1 секунда на спектр, что соответствует методике qEXAFS (quick EXAFS).

Общий вид экспериментального стенда на основе АЭРО приведен на рисунке 2.3. Стенд оборудован системой моторизованных подвижек блока АЭРО (8,9,10) и креплением для адаптивного элемента рентгеновской оптики (7). Используемое крепление (7) разработано с учётом возможности плавного изменения длины консольного вылета изгибного элемента. Это позволяет настраивать собственную резонансную частоту колебаний закреплённого изгибного актуатора. Стенд оборудован системой моторизованных подвижек блока образца (3,4,5) и столиком для образца (6). Устройство столика позволяет закреплять для изучения подготовленные монокристаллические и полидисперсные образцы, а также капилляры. Стенд оборудован системой коллимационных щелевых устройств (2,12,13). Стенд оснащён точечным детектором рентгеновского излучения (14) достаточного быстрого действия.

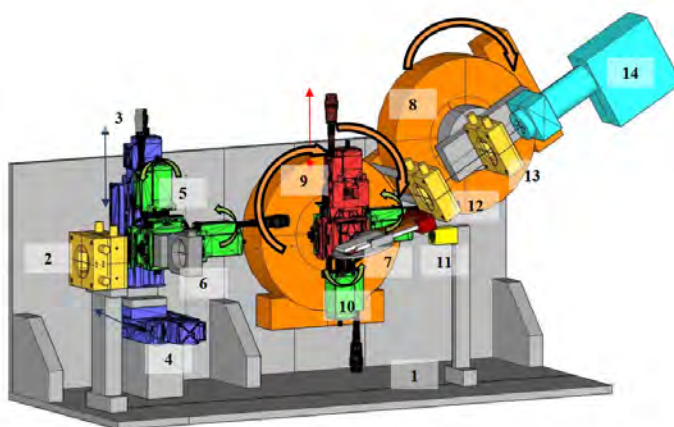


Рис. 2.3. Схема экспериментального стенда на основе АЭРО. 1 – базовая плита; 2,12,13 – коллимирующие щели; 3,4,9 – столики линейные; 5,10 – столики наклонные; 6 – держатель образца; 7 – держатель АЭРО; 8 – гониометр $\theta/2\theta/\omega$; 14 – детектор

Развитие станции Микрофокус

Метод рентгеновской дифракции в условиях полного внешнего отражения синхротронного излучения (РД-ПВО) позволяет получать прямую информацию о кристаллической структуре тонких приповерхностных наноразмерных слоёв за счёт существенного уменьшения глубины проникновения рентгеновских лучей в условиях зеркального отражения по сравнению со стандартными схемами дифракционных экспериментов.

Для реализации метода на станции Микрофокус был разработан и создан экспериментальный стенд. Были проработаны детали сборки и конструкции дополнительных функциональных элементов и инфраструктурных узлов. Была осуществлена дополнительная закупка комплекта оборудования и комплектующих.

Разработанный экспериментальный стенд для проведения исследований с помощью метода рентгеновской дифракции в условиях полного внешнего отражения состоит из поворотной угловой платформы, обеспечивающей рабочий диапазон угловых перемещений не менее $\pm 10^\circ$ с дискретностью перемещения не хуже 10 угловых секунд, азимутального углового актуатора, обеспечивающей высокую скорость перемещения в диапазоне $0^\circ - 360^\circ$ с шагом не хуже 0.1 угловой секунды, углового актуатора в двух взаимно перпендикулярных направлениях, работающей в диапазоне $\pm 10^\circ$ с шагом не хуже 10 угловых секунд, а также вертикального линейного актуатора для вывода образца на оптическую ось экспериментальной станции с рабочим диапазоном линейных перемещений не менее ± 10 мм с шагом не хуже 5 мкм. Контроллер шаговых двигателей обеспечивает управление стендом.

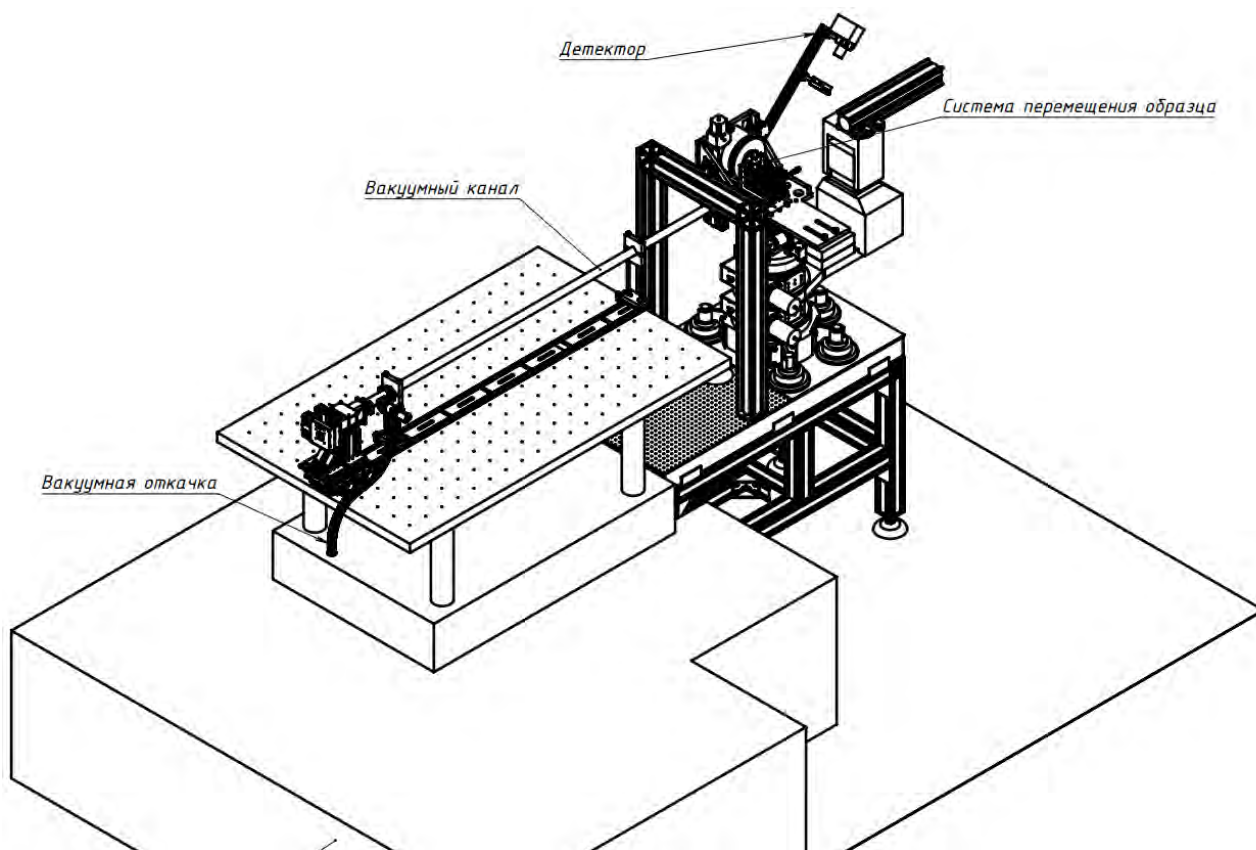


Рис. 2.4. Общий вид экспериментального стенда для проведения дифрактометрических исследований в условиях скользящего падения

Система кислородной очистки оптики

Под действием яркого рентгеновского излучения на оптических элементах каналов вывода синхротронного излучения образуется углеродная пленка, которая ухудшает их отражательные способности и спектральные характеристики. Для решения этой проблемы была разработана система *in situ* очистки рентгено-оптических элементов от углеродного загрязнения. В основе данной системы лежит разработанный диффузионный натекаль кислорода, который создаёт контролируемое давление молекулярно-

го кислорода в вакуумной камере оптического элемента. Под действием ионизирующего синхротронного излучения кислород взаимодействует с углеродным загрязнением, что приводит к образованию CO и CO_2 газов, которые откачиваются штатными вакуумными насосами. В рамках тестовых испытаний диффузионного натекаля было продемонстрировано избирательное пропускание кислорода, возможность прецизионного изменения давления кислорода в диапазоне от $1 \cdot 10^{-11}$ до $1 \cdot 10^{-7}$ мбар, а также повышение давления паров CO и CO_2 под действием синхротронного излучения.

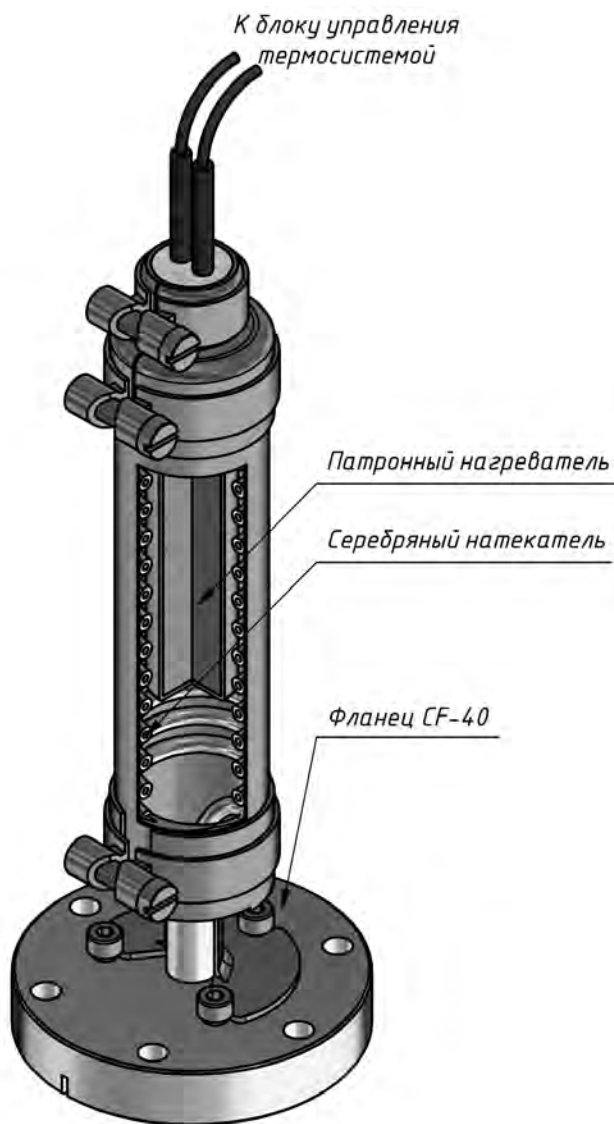


Рис. 2.5. Общий вид вакуумного натекаля

Установка нерассеивающих щелей станции БиоМУР

Критически важным для станций малоуглового рассеяния является величина паразитного фона. Для снижения фона применяются многощелевые схемы коллимации, но и они оказываются не совершенны. Существенно уменьшить уровень фона возможно применяя монокристаллические щели.

На станции «БиоМУР» была установлена новая система коллимации с исполь-

зованием таких щелей. Это позволит практически полностью исключить сигнал паразитного рассеяния на створках, существенно улучшит качество получаемых рентгенограмм и повысит достоверность проводимых малоугловых экспериментов.

Щели изготовлены из монокристаллического кремния в ориентации (110) толщиной 380 мкм, срезанного под углом 90 градусов. Схема закрепления монокристаллов на створках показана на рис. 2.7.

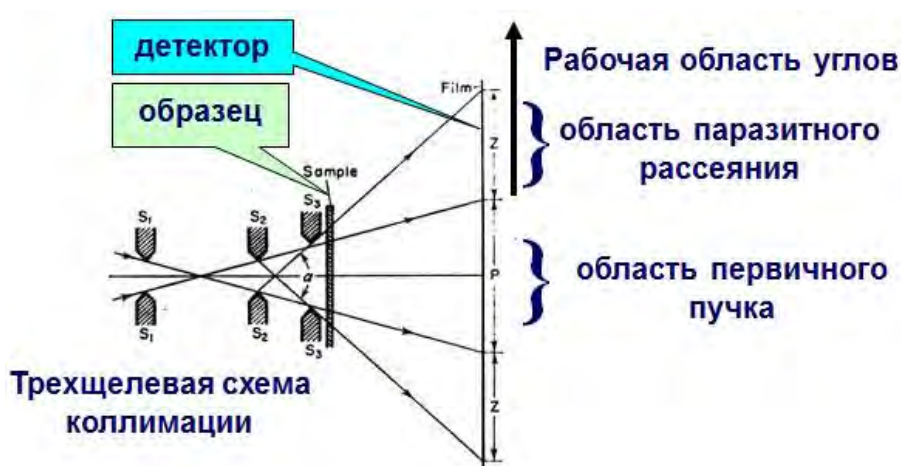


Рис. 2.6. Схема коллимации станции БиоМУР

Была успешно произведена юстировка блоков щелей. В ходе юстировки новые блоки щелей продемонстрировали высокую эффективность и отсутствие каких-либо отражений, имевших место в блоках с ме-

таллическими створками. Отмечено повышение точности позиционирования створок по сравнению со старыми блоками щелей. Каких-либо проблем или отказов в ходе проведения тестирования не выявлено.

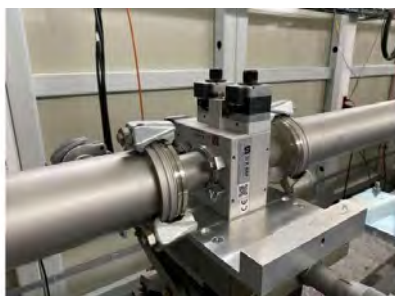
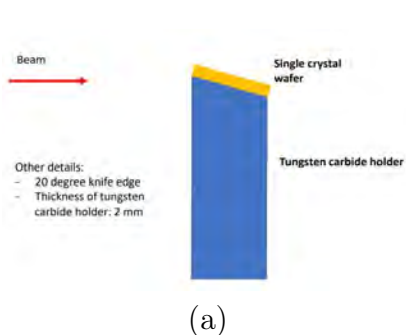


Рис. 2.7. Нерассеивающие щели: (а) конструкция нерассеивающей створки, (б) вторая щель, (в) третья коллимирующая щель

Экспериментальный стенд спектрометрических исследований с различной круговой поляризацией

Экспериментальный стенд для проведения спектрометрических исследований с различной круговой поляризацией предназначен для изменения фазы между горизонтальной и вертикальной составляющей поляризации для данной энергии синхротронного излучения и тем самым модуляции правой и левой круговой поляризации. Главным рабочим элементом экспериментального стенда выступают четверть-волновые фазовые пластинки, в качестве которых выступают монокристаллы слабопоглощающих элементов. Фазовые пластинки работают в геометрии пропускания; гониометрическая система, состоящая из вращательных платформ, настраивает заданное отклонение от дифракционного максимума для данной толщины пластинки и энергии синхротронного излучения, а также заданный угол между кристаллическими плоскостями и плоскостью поляризации излучения. Линейные подвижки обеспечивают работу с несколькими фазовыми пластинками разной толщины, а также тонкую настройку на бездефектную область фазовой пластинки. Дополнительная вращающаяся платформа экспериментального стенда может комплектоваться фотодиодом и обеспечивает автономную настройку угла поворота кристалла.

Экспериментальный стенд будет устанавливаться как оптический элемент на экспериментальных станциях синхротронного излучения работающих в диапазоне 5-15 КэВ в оптический путь после монохроматора. Крепёжная стойка (1) устанавливается на оптический стол; её общая толщина выбрана так, чтобы пучок синхротронного излучения проходил через центр аперту-

ры стенда. Вертикальная поворотная платформа с апертурой (2) крепится к стойке (1) с помощью стойки (3) и используется для настройки угла между кристаллическими плоскостями фазовых пластинок и плоскостью поляризации синхротронного излучения. Крепёжная система (4) соосно крепит первую и вторую горизонтальную вращательную платформу к поворотной платформе (3). Первая горизонтальная поворотная платформа (5) используется для задания углового отклонения от дифракционного максимума для фазовых пластинок. Линейные подвижки (6) обеспечивают работу с несколькими фазовыми пластинками разной толщины, а также тонкую настройку на бездефектную область фазовой пластинки.

Держатель фазовых пластинок (7) рассчитан на работу с тремя элементами. Вторая вращающаяся платформа экспериментального стенда (8) может комплектоваться фотодиодом и обеспечивает автономную настройку угла поворота кристалла. Держатель фотодиода (9) имеет систему ласточкин хвост для ручного удаления-приближения к фазовой пластинке.

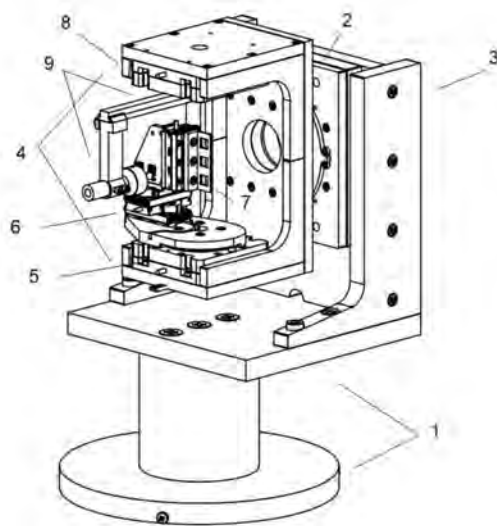


Рис. 2.8. Схема экспериментального стенда спектрометрических исследований с различной круговой поляризацией

2.2. Развитие экспериментальной базы ИР-8

Определение величины плотности потока монохроматических нейтронов в позиции образца на станциях НИК ИР-8

Плотность потока монохроматических нейтронов — важная характеристика экспериментальной станции, которая позволяет с большей точностью рассчитать время эксперимента и саму возможность его реализации. С помощью метода активации золота на экспериментальных станциях СТРЕСС, МОНД, АТОС, ДИСК, ДРАКОН, СТОИК определены плотности потока монохроматических нейтронов в позиции образца, таблица 2.2. Установлено, что плотность потока нейтронов на образце на станции СТОИК, где используется монохроматор из идеального монокристалла кремния на два порядка меньше, чем на станциях ДРАКОН, ДИСК, АТОС, СТРЕСС и МОНД, где используются монохроматоры из мозаичных (мозаичность $0.2 - 0.5^\circ$) монокристаллов или изогнутый идеальный кристалл кремния.

Таблица 2.2. Плотность монохроматического пучка нейтронов на месте образца

Станция	λ_0 [Å]	E_0 [мэВ]	I [н/(см ² ·сек)]
СТРЕСС, ГЭК № 3	1.54	34.486	$1.00(5) \cdot 10^6$
МОНД, ГЭК № 4	1.066	71.97	$3.48(17) \cdot 10^6$
АТОС, ГЭК № 5	1.524	35.21	$3.02(15) \cdot 10^6$
ДИСК, ГЭК № 6	1.67	29.326	$1.66(8) \cdot 10^6$
ДРАКОН, ГЭК № 8	1.2 2.4	56.796 14.199	$3.60(18) \cdot 10^6$
СТОИК, ГЭК № 9	1.56	30.607	$1.38(7) \cdot 10^4$

Модернизация защиты блока монохроматора дифрактометра СТРЕСС

Обновлена и конструктивно изменена биологическая защита блока монохроматора на станции СТРЕСС. Выбранное конструктивное решение (рисунок 2.9) позволи-

ло уменьшить уровень фона в три и более раз по периметру блока монохроматора по сравнению с начальной сборкой биологической защиты на станции в 2013 г.

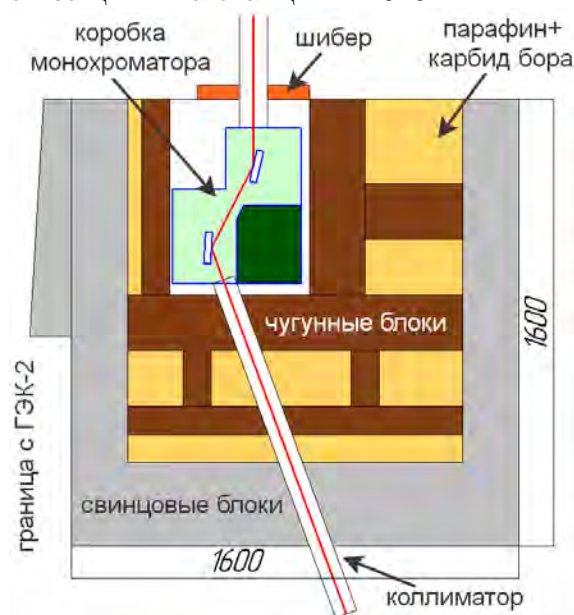


Рис. 2.9. Схема защиты блока монохроматора

Работы по расширению приборной базы

В 2020 г. полностью завершены подготовительные работы к монтажу источника холодных нейтронов с нейтронотводной системой, ремонтные и отделочные работы помещений для размещения в них новых нейтронных станций: спектрометра малоуглового рассеяния холодных нейтронов (МУРХН); дифрактометра для исследования микрообразцов под высоким давлением (МИКРО); рефлектметра поляризованных нейтронов (РЕФРА) (рисунок 2.10).

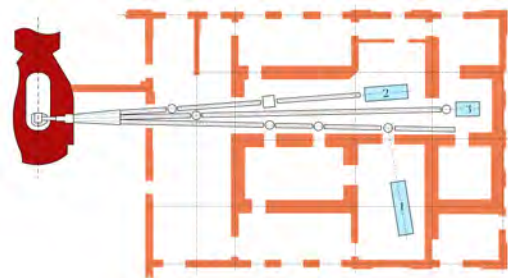


Рис. 2.10. Схема расположения нейтронотводной системы и станций в нейтронотводном зале: 1 — РЕФРА; 2 — МУРХН; 3 — МИКРО

Часть II

Научная деятельность комплекса

Глава 3

Избранные научные результаты

Исследования молекулярных механизмов действия амфифильных блок-сополимеров, применяемых для создания наносомальных форм лекарственных препаратов

Полиэлектролитные комплексы полианионов с биологически активными соединениями широко применяются в медицине и фармакологии как лекарственные формы для пролонгирования действия медицинских препаратов. В частности, известно, что амфифильные блок-сополимеры (плюроники) способны увеличивать проницаемость мембран по отношению к противоопухолевым антибиотикам, а также подавлять выброс лекарства из раковых клеток, тем самым повышая эффективность химиотерапии.

Исследования влияния поликатионов на проницаемость отрицательно заряженных липидных мембран по отношению к противоопухолевому антибиотику доксорубину показали, что степень воздействия поликатиона заметно возрастает с увеличением содержания анионного компонента в мембране. Для выяснения физико-химической основы этих процессов большее значение имеют модельные исследования на более простых системах с контролируемым составом. В качестве одной из таких моделей часто используются монослои фосфолипидов, сформированные на поверхности водной субфазы в ленгмюровской ванне. В проведенных исследовани-

ях изучалось взаимодействие водорастворимого полуксамера P188 с ленгмюровскими фосфолипидными монослоями различного состава, для моделирования различных типов взаимодействия: зарядовые, гидрофобные, водородные или дипольные.

Структура пленки исследовалась методами рентгеновской дифракции в скользящей геометрии и рентгеновской рефлектометрии.

Двумерные карты дифракционного рассеяния и экспериментальные кривые рентгеновской рефлектометрии представлены на рисунке 3.1

Как следует из сравнения GID данных для монослоя DPPG на чистой воде (рис. 3.1 а) и на растворе полуксамера (рис. 3.1 б), присутствие полуксамера в водной субфазе не вызывает каких-либо повреждений кристаллической решетки монослоя. Об этом свидетельствует отсутствие изменений на двумерных GID картах. По данным рентгеновской рефлектометрии не удалось обнаружить образования слоя полуксамера под монослоем фосфолипида из-за низкого контраста электронной плотности воды и полуксамера. Аналогичные результаты были получены в исследованиях, проведенных на монослоях фосфолипидов DOPS и DPPE.

Полученные результаты показывают, что полуксамер P188 не изменяет молекулярную организацию модельной мембраны. Таким образом, применение этого соединения в фармакологии является безопасным, так как не вызывает структурных нарушений в липидной компоненте клеточных мембран.

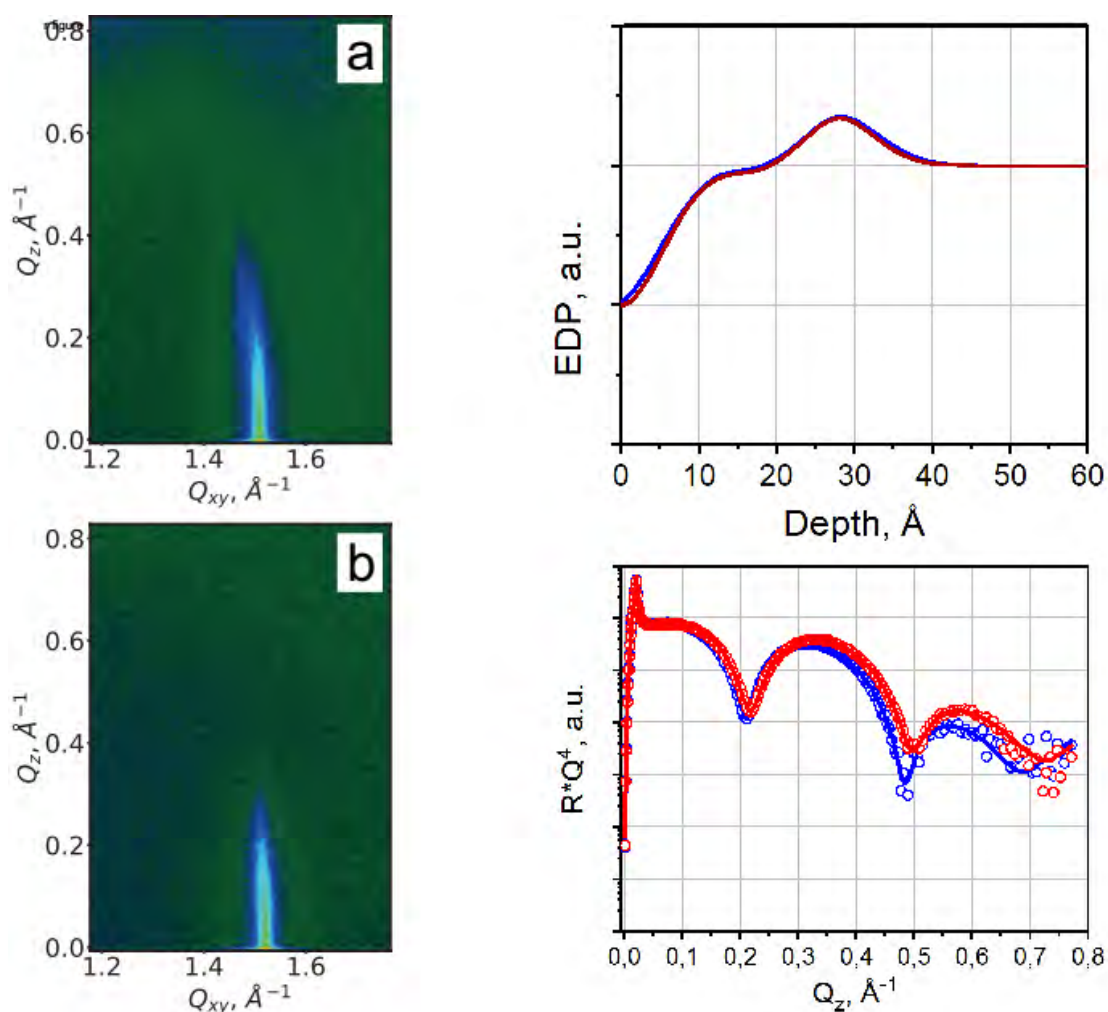


Рис. 3.1. Двумерные карты дифракционного рассеяния для фосфолипидного монослоя (DPPG) на чистой воде (а) и на растворе полуксамера (б). Кривые рентгеновского отражения для фосфолипидного монослоя (DPPG) на чистой воде (красный) и на растворе полуксамера (синий). Профили распределения электронной плотности в фосфолипидном монослое (DPPG) на чистой воде (красный) и на растворе полуксамера (синий)

Исследование структурных параметров Anti-SARS-CoV-2 аптамеров

Пандемия, вызванная распространением коронавируса SARS-CoV-2 потребовала создания новых средств для диагностики и лечения инфекции в кратчайшие сроки. Методика конструирования и подбора аптамеров является одной из самых эффективных для разработки средств маркирования вируса, поскольку аптамеры связываются адресно только с компонентами вируса и могут блокировать его взаимодействие с клетками организма. Методика включает в себя молекулярное моделирование, расчет энергий взаимодействия, теоретический расчет формы и размеров и проверку полученных данных на эксперименте методом малоуглового рассеяния.

Эксперименты по малоугловому рассеянию были проведены на станции «БиоМУР»

Курчатовского источника синхротронного излучения. Результаты эксперимента представлены на рисунке 3.2. Были исследованы несколько образцов аптамеров (Apt27 – Apt31), наиболее подходящих к белку RBD, являющимся основным действующим доменом в молекуле SARS-CoV-2, а также сам RBD. Были определены размеры и структурные параметры аптамеров, такие как радиус Гинье. Было установлено, что в случае с Apt31 распределение по расстояниям, получаемое путем Фурье-преобразования малоугловой кривой, показывает наиболее вероятное образование комплекса с резким увеличением радиуса Гинье и появлением дополнительных максимумов, характерных для двухкомпонентной системы. Полученные данные, совместно с результатами других методов исследования, позволили установить, что наиболее подходящим для маркировки компонентов коронавируса является аптамер Apt31.

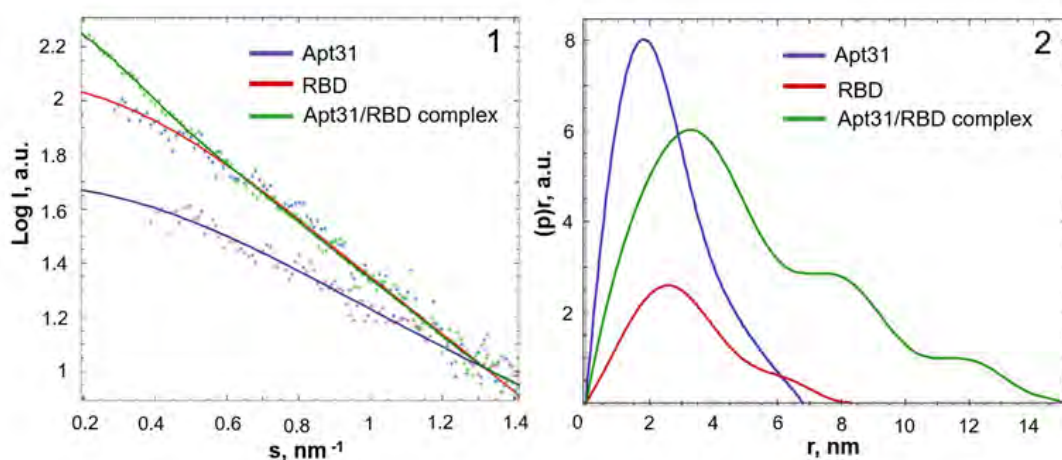


Рис. 3.2. Данные МУРР для белка RBD и наиболее подходящего к нему аптамера Apt31

Создание принципиально нового кальциевого индикатора NCaMP7

Генетически кодируемые кальциевые индикаторы представляют собой химерные белки на основе комбинирования флуоресцентного белка с белком-сенсором кальция. Такие белки обладают способностью флуо-

ресцировать в ответ на изменение в окружающей среде концентрации ионов кальция. Будучи проэкспрессированы в клетках трансгенных животных, они позволяют *in vivo* наблюдать за клеточными процессами, связанными с изменением внутриклеточной концентрации кальция, к примеру, за процессами передачи нервного импульса.

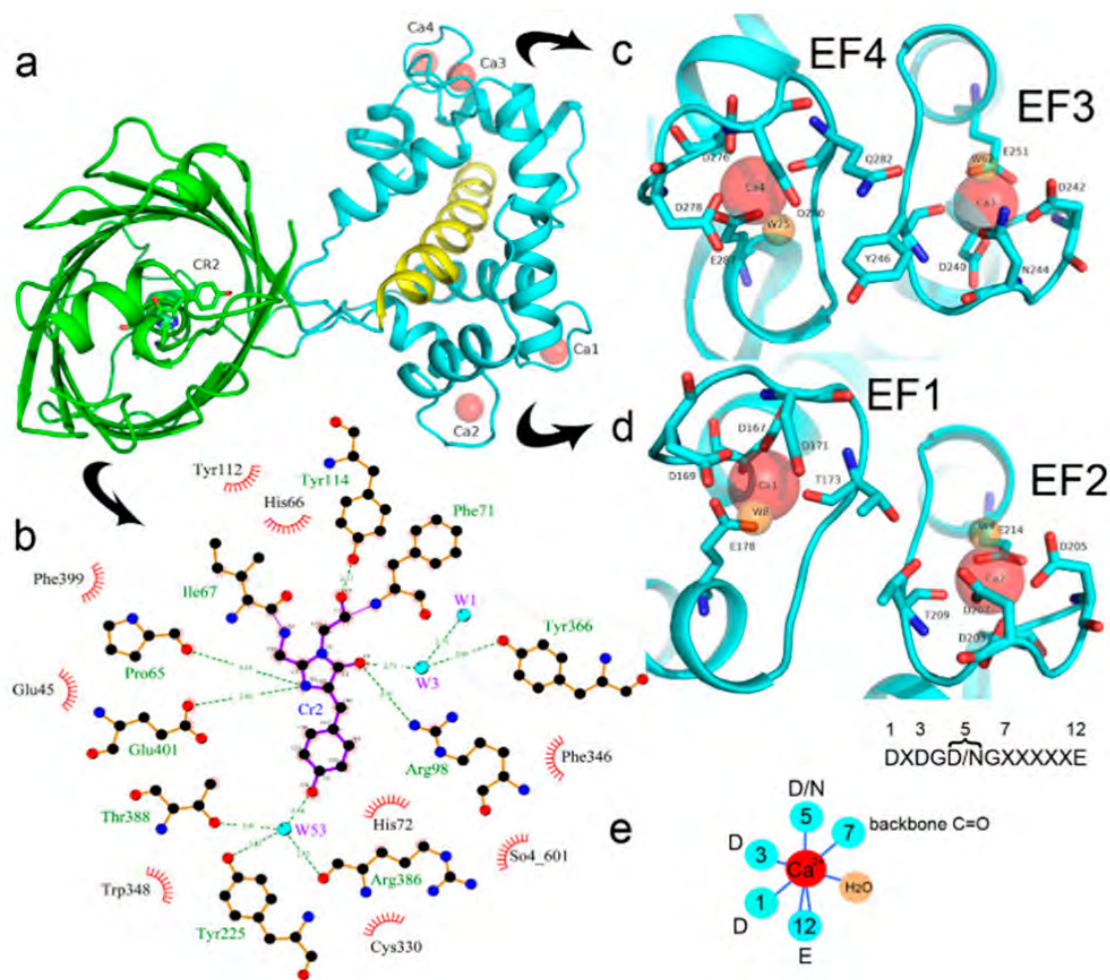


Рис. 3.3. Кристаллическая структура индикатора NCaMP7 (PDB ID – 6XW2): (a) – Изображение кристаллической структуры NCaMP7. (b) – Непосредственное окружение хромофора и ионов кальция (c, d). (e) – Координационная сфера иона кальция (красный цвет) и положения координирующих кальций остатков в последовательности петель EF1-4-hands

Большинство разработанных ранее зеленых кальциевых индикаторов основаны на использовании в качестве флуоресцентной составляющей белка eGFP, являющегося производным от классического GFP, выделенного из *Aequorea victoria*. Соответственно их яркость ограничена ярко-

стью самого eGFP. При конструировании NCaMP7 в качестве флуоресцентной части был использован другой флуоресцентный белок – mNeonGreen, производный от природного белка из *Branchiostoma lanceolatum* и являющийся на настоящий момент одним из самых ярких флуоресцентных белков в

области зеленого спектра. Полученный на его базе кальциевый индикатор NCaMP7 превосходит по яркости свой аналог на основе eGFP-GCaMP6 более чем в полтора раза, что делает его одним из самых ярких индикаторов, разработанных на данный момент.

В лаборатории Белковой Фабрики (подразделение НИЦ Курчатовский институт) были сконструированы плазмиды, несущие ген исследуемого белка, состоящего из фюжина mNeonGreen с кальций-связывающей частью – кальмодулином и пептидом M13. Данная конструкция была введена в экспрессирующую культуру *E.coli* и оптимизирована несколькими раундами направленной эволюции. В результате была получена библиотека, состоящая из нескольких вариантов NCaMP, отличающихся по своим биохимическим характеристикам, в частности по аффинности к кальцию. Различные варианты NCaMP были выделены и охарактеризованы *in vitro* по кинетике связы-

вания кальция, яркости, контрастности и т.д. Для лучшего по характеристикам белка, NCaMP7, методом рентгеноструктурного анализа была получена пространственная структура с разрешением в 1.8Å (рисунок 3.3). Эта информация позволяет анализировать структурные основы флуоресценции при связывании кальция и влияние точечных мутаций на характеристики индикатора.

После этого на клеточных линиях человека HeLa и нейрональных культурах изучена локализация индикатора в клетках и оценена скорость ответа индикатора на изменение внутриклеточной концентрации кальция. Были получены трансгенные мыши с геном индикатора, и показана применимость NCaMP7 для визуализации активности нейронов коры головного мозга мышат методом высокоскоростной двухфотонной микроскопии.

Изучение молекулярных механизмов изменения структурно-функциональных свойств гемоглобина в условиях, моделирующих окислительный стресс в организме

В медицинской практике успешно применяется системная озонотерапия, в частности внутривенное вливание озонированного физиологического раствора и озонирование крови. Однако механизмы действия озона на компоненты крови и, в частности, на молекулы гемоглобина остаются не до конца изученными.

Для исследования данной проблемы изучены нарушения структурно-функциональных свойств гемоглобина в условиях, моделирующих окислительный стресс в организме. Использованы три различных редокс-активных соединения: перекись водорода, озон, пероксинитрит. В качестве контрольного образца дополнительно исследовался интактный гемоглобин.

Структурные характеристики гемоглобина изучались для пленок гемоглобина, сформированных на поверхности водной субфазы в Ленгмюровской ванне методами рентгенофлуоресцентного анализа и рентгеновской абсорбционной спектроскопии в геометрии полного внешнего отражения на станции «Ленгмюр».

Всего было выполнено 4 серии измерений: контроль (интактный гемоглобин); гемоглобин, обработанный раствором перекиси водорода; гемоглобин, обработанный раствором пероксинитрита; гемоглобин с добавлением озонированной воды. Метод рентгенофлуоресцентного анализа в геометрии полного внешнего отражения использовался для выявления изменения элементного состава белкового монослоя. Для количественной оценки содержания ионов металлов в молекуле гемоглобина, в качестве реперного значения была использована интенсивность выхода флуоресценции из ионов серы, которые присутствуют в аминокислотных остатках цистеина и метионина. Весьма примечательным в полученных экспериментальных

данных является увеличение отношения железо/сера. Характер его изменения различен для всех исследованных 4 серий экспериментов. Наибольшую способность связывать ионы металлов продемонстрировал гемоглобин с добавлением озонированной воды.

Локальное окружение ионов железа в гемоглобине проанализировано в динамике с помощью метода рентгеновской абсорбционной спектроскопии в геометрии полного внешнего отражения. XANES спектры за К-краем поглощения железа от монослоя интактного гемоглобина при фиксированном угле $\theta \leq \theta_C$ записывали непрерывно в течение 24 часов. За время измерений на спектрах наблюдалось постепенное увеличение интенсивности первого максимума и снижение интенсивности предкраевой особенности. На рисунке 3.4 представлены первый и последний спектры в этой серии измерений. Аналогичное поведение было характерно для всех 4х серий измерений.

Полученные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что под действием повреждающих факторов гемоглобин приобретает свойство связывать ионы металлов, содержащиеся в воде в следовых количествах. Структурные сайты связывания железа и цинка в белковых молекулах обычно включают четыре аминокислотных остатка: гистидин, цистеин, аспарагин и глутамат, которые имеют высокое пикомолярное или фемтомолярное сродство к ионам металлов, что позволяет им связывать металл при концентрации от 10^{-8} до 10^{-11} моль/л. Можно предположить, что формирование дополнительных высокоафинных центров связывания металлов на молекулах гемоглобина происходит в два этапа. Сначала под действием редокс-активных соединений происходит лабильзация конформации белка с демаскировкой «скрытых» реакционноспособных групп (гистидины, цистеины, и др.), которые становятся стерически доступными для связывания ионов металлов из воды. На втором этапе, в результате формирования монослоя белка в ленгмюровской ванне возникают условия для создания межмолекуляр-

ных контактов, благоприятных для связывания металлов.

Условия нахождения гемоглобина в структурированном состоянии в виде пленки отчасти могут имитировать условия на-

хождения белка внутри клетки, поэтому полученные результаты могут быть полезны для интерпретации поведения белка в их естественной среде, внутри клетки.

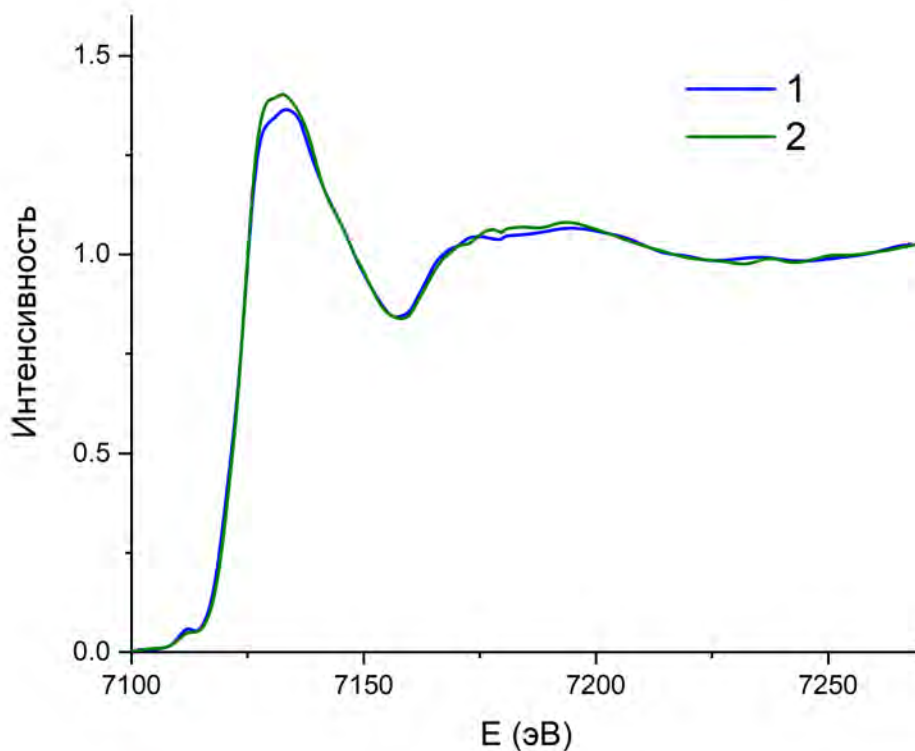


Рис. 3.4. Изменение XANES спектров за К-краем поглощения железа во времени для белковой плёнки гемоглобина, сформированной на поверхности водной субфазы: 1 – спектр в начале эксперимента, 2 – спектр в конце эксперимента, спустя 24 часа

Механизм повышенной сорбции урана на дефектный оксид графена

Высокодефектный оксид графена является перспективным сорбентом при обработке радиоактивных отходов. Дефектный оксид графита, приготовленный с помощью процедуры окисления Хуммерса из восстановленного оксида графена, гораздо лучше сорбирует уран и другие радионуклиды, чем оксиды графена, приготовленные другими способами. Предыдущие исследования показали, что сорбция радионуклидов на оксиде графена связана с его дефектной структурой. Точное понимание механизма сорбции может помочь усовершенствовать методы синтеза этого материала для дальнейшего улучшения его сорбционных свойств. Для уточнения этого механизма использован метод рентгеновской спектроскопии поглощения на L_3 -крае урана и расчёты атомной структуры локального окружения в рамках теории функционала плот-

ности (DFT). Для этих целей использовались Курчатовский источник синхротронного излучения и Объединённый вычислительный кластер НИЦ «Курчатовский институт». Полученные данные совместно с результатами других методов исследования позволили установить, что высокая сорбционная ёмкость дефектного оксида графена определяется функциональными карбоксильными группами на краях «дырок» в листе оксида графена (рисунк 3.5).

Результаты работы опубликованы в статьях:

N. Boulanger et al. Enhanced Sorption of Radionuclides by Defect-Rich Graphene Oxide // ACS Appl. Mater. Interfaces 2020, N12, V40, pp 45122–45135. doi:10.1021/acsami.0c11122

A.S. Kuzenkova et al. New insights into the mechanism of graphene oxide and radionuclide interaction // Carbon, 2020, v 158, pp 291–302. doi:10.1016/j.carbon.2019.10.003

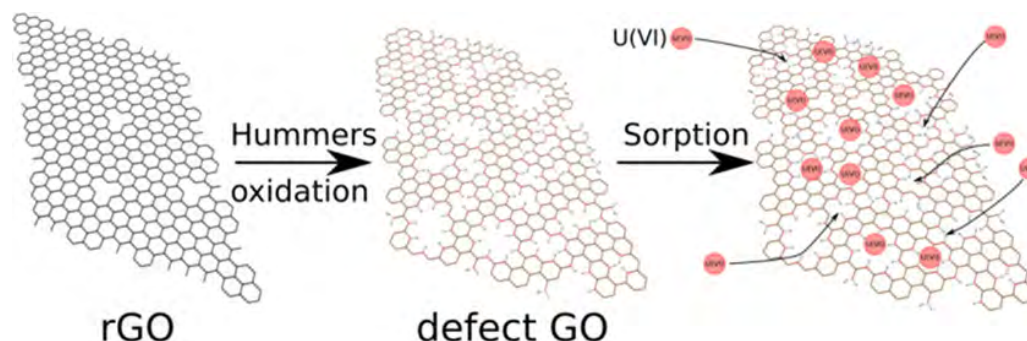


Рис. 3.5. Механизм сорбции урана на дефектах оксида графена

Образование метастабильной фазы Si(III) в кремнии при воздействии фемтосекундного лазерного излучения

В результате воздействия лазерного фемтосекундного излучения в веществе, в частности в кремнии, образуются волны давления, которые могут индуцировать фазовые превращения с образованием метастабильных фаз. Однако механизм их формирования до сих пор неизвестен. Как правило, такие структурные превращения наблюдались при приложении высокого давления в алмазных наковальнях или в результате импульсной ударной бомбардировки поверхности кристаллов кремния через медную пластину пневмоснарядами диаметром 30 мм.

Целью настоящей работы было обнаружение структурных изменений в кремнии, под воздействием фемтосекундного лазерного импульса, с использованием метода высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии.

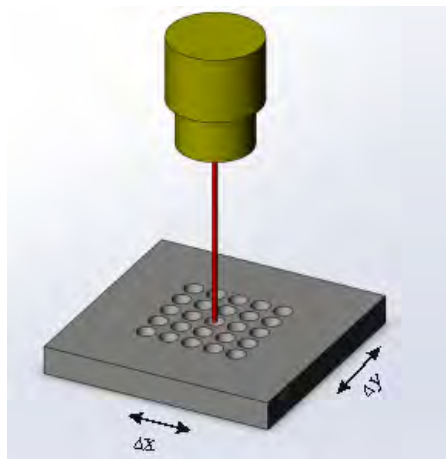


Рис. 3.6. Облучение образца Si-лазером

Приведены результаты исследования двух образцов Si-I(111) (пр.гр. $Fd\bar{3}m$), облученных (рисунок 3.6) ультракороткими лазерными импульсами ИК диапазона с центральной длиной волны $\lambda \sim 1240$ нм, длительностью каждого импульса 100-110 фс. Размер диаметра перетяжки лазерного пучка составлял порядка 10 мкм. Энергия воздействующих лазерных импульсов для образца № 1 составляла 790 мкДж, что с учетом фемтосекундной длительности импуль-

са создает условия для индуцирования фазовых переходов. Образец № 2 был облучен при использовании энергии лазерных импульсов 16 мкДж, что заведомо меньше требуемого значения энергии импульса для создания порогового значения давления.

Образцы были исследованы методом рентгеновской дифрактометрии (XRD) с использованием синхротронного излучения ($E = 12$ кэВ) на станции «Фаза» КИСИ-Курчатов в фокусирующей моде с применением фокусирующих зеркал и изгибного монохроматора Si(111), как в режиме $\omega - 2\theta$ сканирования (рисунок 3.7 слева), так и при сканировании детектором при скользящем угле падения (2°) излучения (рисунок 3.7 справа).

Измерения XRD кривых для необлученной части исследуемых образцов кремния показали их хорошее кристаллическое качество без дополнительных структурных включений.

Измеренные XRD кривые для облученной области обоих исследованных образцов при $\omega - 2\theta$ сканировании в угловом диапазоне между пиками Si(111) и Si(333) представлены на рисунке 3.8 (левый рисунок), а на правом рисунке показаны результаты сканирования детектором при скользящем угле падения рентгеновских лучей.

На кривых от образца № 1 видно, что дифракционный пик при $q_z \sim 4 \text{ \AA}^{-1}$ соответствует отражению Si-I (222). Кроме того, на кривой образца 1 присутствует несколько дополнительных дифракционных пиков (указаны стрелками) при $q_z \sim 3.3 \text{ \AA}^{-1}$ и $q_z \sim 3.85 \text{ \AA}^{-1}$, отсутствующих на кривой образца № 2. Следует отметить, что наличие этих пиков не зависит от азимутального положения исследуемого образца 1, что в первую очередь свидетельствует об их поликристаллическом происхождении. При этом данным волновым векторам не соответствуют узлы обратной решетки Si-I, и, следовательно, они могут быть идентифицированы как отражения (222) и (400) поликристаллической метастабильной фазы Si-III (пр.гр. $Ia\bar{3}$). С использованием формулы Шеррера мы оцениваем средние размеры кристаллитов фазы Si-III приблизительно 98 ± 15 нм.

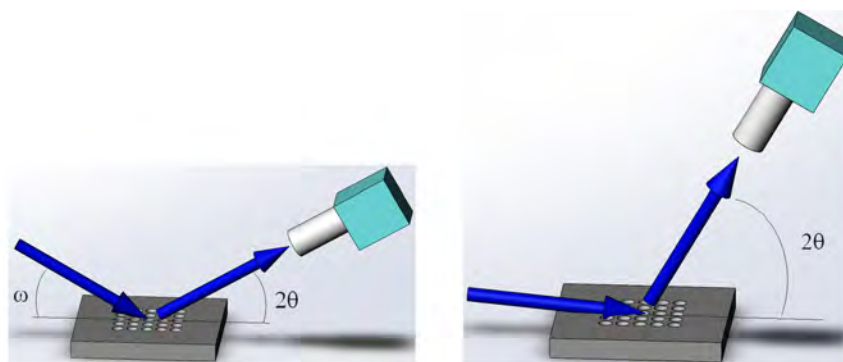


Рис. 3.7. Схема записи XRD кривых в режиме $\omega - 2\theta$ сканировании (слева) и в режиме скользящего падения (справа)

Аналогичные результаты были получены при сканировании детектором в условиях скользящего падения СИ (рисунок 3.7). На полученных кривых для образца № 1 также наблюдаются дифракционные пики при $q_z \sim 3.3 \text{ \AA}^{-1}$ и $q_z \sim 3.85 \text{ \AA}^{-1}$. При сканировании детектором нам удалось зафиксировать также пик при $q_z \sim 4.65 \text{ \AA}^{-1}$, который соответствует отражению (224) той же метастабильной фазы Si-III. Его наличие также не зависит от азимутального положения образца. То есть подтверждает поликристаллический характер образовавшейся фазы Si-III. Отметим, что никаких дополнительных дифракционных пиков на КДО, а следовательно, структурных фаз, отличных от Si-I, для образца № 2 не наблюдается при обеих геометриях эксперимента.

Таким образом, методами рентгеновской диагностики показано образование метастабильной фазы Si-III (пр.гр. $Ia\bar{3}$) под действием волн давления, возникающих в Si-I при облучении фемтосекундным лазерным импульсом с энергией 790 мкДж. В то время как для образца, облученного фемтосекундным импульсом с энергией 16 мкДж, образование дополнительных фаз не наблюдалось. Вероятно, условия облучения образца 2 недостаточны для образования метастабильных фаз в кремнии. Можно утверждать, что с развитием техники возможность управления фазовым составом твердого тела с помощью фемтосекундного лазерного излучения может найти широкое применение в аддитивных технологиях.

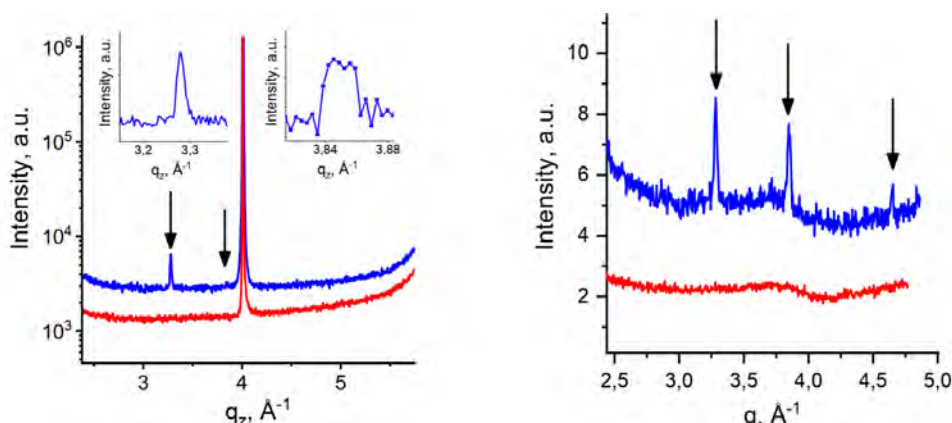


Рис. 3.8. XRD кривые в режиме $\omega - 2\theta$ сканирования (слева) и в режиме скользящего падения (справа). Синим цветом приведены КДО образца № 1, красным – № 2

Структурные и электронные свойства комплексов цинка бидентатных азометиновых лигандов, как потенциальных материалов для OLED дисплеев

В последние годы цинковые комплексы азометиновых лигандов все чаще используются в качестве альтернативы иридиевым комплексам активных сред в устройствах на органических светодиодах (OLED). Они характеризуются высокой термостойкостью, высокой температурой стеклования, лёгкой сублимацией при изготовлении аморфных плёнок, разнообразием структур, относительной простотой синтеза и разумными затратами. Ряд комплексов цинка может быть использован при разработке OLED-устройств в качестве слоёв для инжекции дырок, а также слоев для переноса электронов. Цинковые комплексы бидентатных азометиновых лигандов, которые являются производными 2- (гидрокси- или N тозил-амино) бензальдегидов и различных аминов, изучались многими авторами как люминесцентные материалы. Эти соединения проявляют фотолюминесцентные свойства и могут излучать в следующей области длин волн $\lambda = 480\text{--}553$ нм. В Южном Федеральном Университете (ЮФУ) на основе та-

ких комплексов были успешно изготовлены OLED-устройства различных конфигураций, которые продемонстрировали изменение яркостных характеристик в зависимости от конструкции комплекса. В зависимости от типа основания Шиффа комплексы цинка излучают в широком спектральном диапазоне от жёлтого до темно-синего.

На экспериментальной станции РСА методом монокристалльной рентгеновской дифракции получены модели пространственных структур соединений синтезированных в ЮФУ (рисунок 3.9).

Рентгеноструктурный анализ показал, что молекулярные структуры 1a–с очень похожи друг на друга. Все соединения могут быть представлены как одноядерные комплексы цинка (II) с двумя бидентатноорганическими лигандами, координированными с центральным атомом металла через два атома кислорода и два атома азота. Двугранные углы между плоскими салицилимино-фрагментами двух органических лигандов составляют $85.70(4)$, $88.35(4)/85.24(5)$ и $75.31(8)$ для 1a–с соответственно. Как и следовало ожидать, длины связей ZnO существенно короче, чем у Zn N.

На основе рентгеноструктурных данных в ЮФУ разрабатываются новые OLED-матрицы.

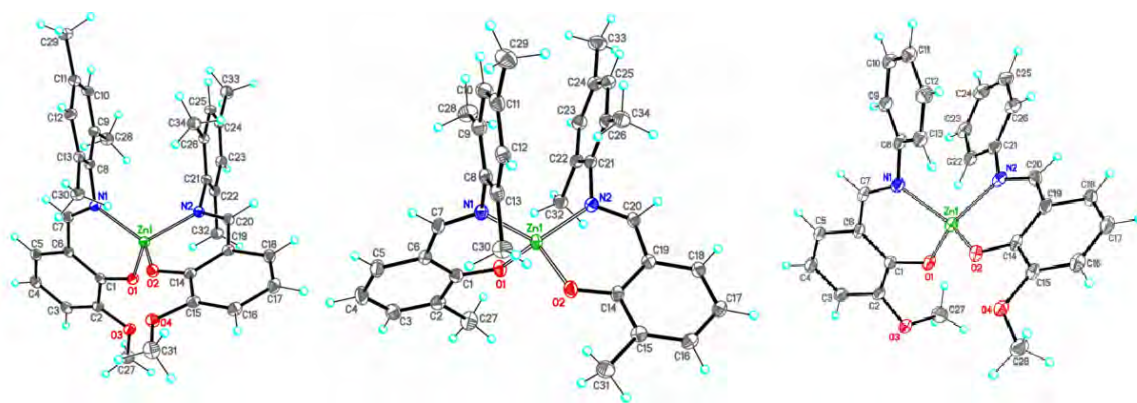


Рис. 3.9. Модели трех полученных в результате рентгеноструктурного эксперимента азометиновых комплексов с Zn

Исследование процесса разложения платино-железного ацетатного комплекса в инертной и восстановительной средах

На станции «СТМ» КИСИ методом XAFS в режиме *in situ* были исследованы химические превращения платино-железного ацетатного комплекса $[PtFe(OAc)_4]_2O$ при нагревании в инертной (N_2) и восстановительной ($N_2 + 5\%H_2$) средах. Данный комплекс рассматривается в качестве потенциального одномолекулярного предшественника для синтеза частиц биметаллической фазы $PtFe$ – перспективного материала для электродов топливных элементов.

По данным XAS на краях поглощения платины и железа, в исходном комплексе оба металла находятся в окисленном состоянии, о чем свидетельствует пик кривой ра-

диального распределения атомов в интервале $1.5 - 2 \text{ \AA}$, соответствующий кислородному окружению атомов металла. Нагревание образца комплекса в инертной среде (N_2) приводит к восстановлению платины при $190-200^\circ\text{C}$. Кислородный пик по краю Pt исчезает, и максимум кривой РРА смещается на расстояния $2-3 \text{ \AA}$, соответствующие координации «металл-металл». Железо при этом сохраняет преимущественно кислородную координацию, и даже после обработки при 250°C восстанавливается не полностью. По результатам моделирования EXAFS на краях Pt и Fe оба металла присутствуют в координационном окружении друг друга, причём платина соседствует преимущественно с железом, а железо – с платиной. Значения межатомных расстояний $Pt - Fe$ ($2.60 \text{ \AA}$) и $Pt - Pt$ ($2.71 \text{ \AA}$) сходны с таковыми для интерметаллида $PtFe$ с тетрагональной структурой.

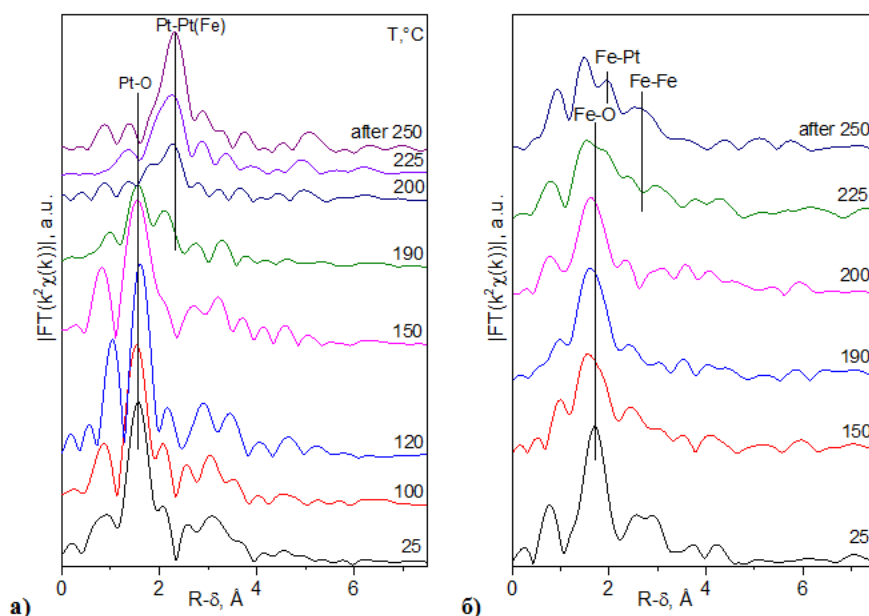


Рис. 3.10. Данные EXAFS для комплекса $[PtFe(OAc)_4]_2O$ в процессе термического разложения в токе азота: а) L3-край Pt б) K-край Fe

В восстановительной среде ($N_2 + 5\% H_2$) восстановление металлов происходит в более мягких условиях. Pt избавляется от кислородного окружения уже при 150°C . В диапазоне $150-200^\circ\text{C}$ происходит полное восста-

новление Fe . Следует отметить, что формы спектров XANES, полученных при разложении комплекса в инертной и восстановительной средах при температуре $\sim 250^\circ\text{C}$, значительно отличаются.

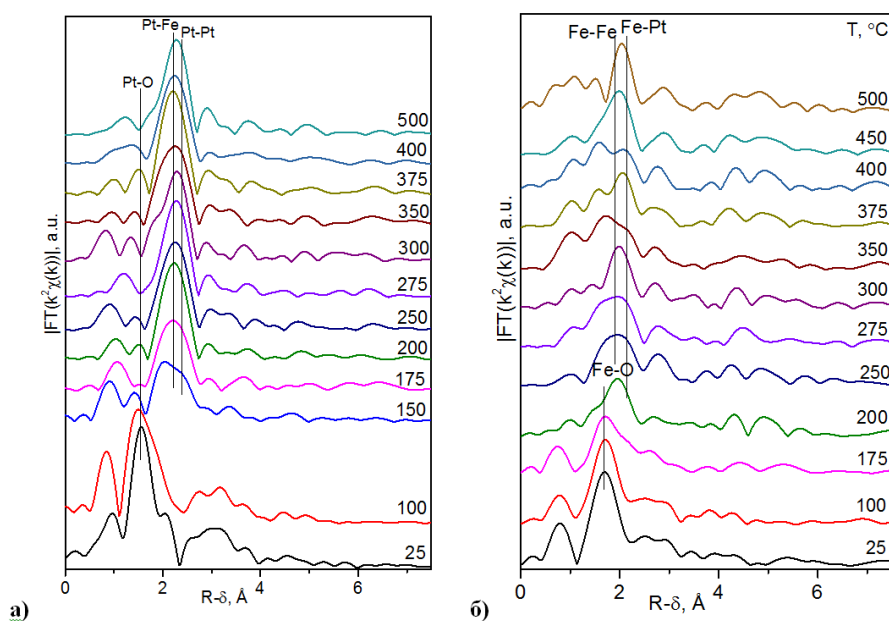


Рис. 3.11. Данные EXAFS для комплекса $[PtFe(OAc)_4]_2O$ в процессе термического разложения в токе 5% H_2/N_2 : а) L_3 -край Pt б) K -край Fe

Результаты одновременного моделирования EXAFS-спектров для обоих краёв показывают, что при нагревании образца в токе 5% H_2/N_2 до 130°C кислородное окружение сохраняется на краях поглощения и железа и платины, однако координационное число (далее КЧ) для сферы $Pt - Fe$ составляет всего 0.3, а КЧ для этой сферы по краю железа равно 2.7 – несоответствия в значениях КЧ могут быть связаны как с частичным разрушением комплекса, в частности, с образованием ацетата или оксида платины, так и с большой погрешностью в определении КЧ. Нагревание до 200°C существенно меняет вид спектра: полностью исчезает кислородное окружение, по краю платины появляются новые сферы $Pt - Fe$ и $Pt - Pt$, относящиеся к биметаллической фазе и металлической платине соответственно. На краю железа также наблюдаются две сферы $Fe - Fe$, соответствующие первой и второй координационным сферам $\alpha - Fe$. Дальнейшее повышение температуры выше 250°C не приводит к существенным изме-

нениям КЧ (в пределах погрешности), однако на краю железа отмечено уменьшение расстояния $Fe - Fe$ во второй координационной сфере металлического железа с 2.80 до 2.70 Å. Вероятно, это может быть связано с превращением железа в биметаллическую $FePt$ фазу с последующей ее гомогенизацией. Также, возможно, структура образующегося интерметаллида $FePt$ отличается от тетрагональной, либо ее параметры решётки искажены.

Таким образом, и в инертной, и в восстановительной средах из комплекса образуются биметаллические фазы, имеющие различную структуру в зависимости от среды. Исходя из координационных чисел можно предполагать, что частицы биметаллических фаз, то есть твёрдого раствора с ГЦК-решёткой и интерметаллида $PtFe$ с тетрагональной решёткой, в обоих случаях имеют структурный мотив «ядро-оболочка»: ядро богато платиной, оболочка железом. По результатам работы готовится статья.

Изучение взаимодействия солей редкоземельных металлов с фосфолипидными монослоями, сформированными на поверхности водной субфазы

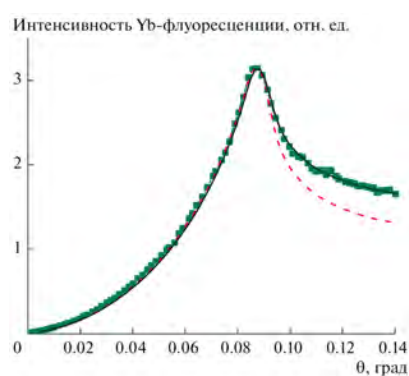
Характер взаимодействия ионов редкоземельных металлов с внешней мембраной бактериальной клетки играет определяющую роль в развитии целого каскада сложнейших биохимических процессов, таких как блокировка ионных каналов или активных транспортных систем клеточной оболочки бактерии, образование комплексов с белками внешней мембраны с последующим изменением структурно-функционального состояния белковых молекул.

В экспериментах по изучению молекулярных механизмов взаимодействия редкоземельных металлов с клеточной мембраной использованы модельные мембраны из фосфолипидов, относящихся к основным липидам наружной бактериальной мембраны, но отличаются по химическому строению головных групп, а также по структуре алифатических цепей: фосфатидилэтаноламин (1,2-Dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphoethanolamine, DPPE) и фосфатидилглицерин (1,2-Dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphoglycerine, DPPG). Методом стоячих рентгеновских волн в геометрии скользящего падения исследовано взаимодей-

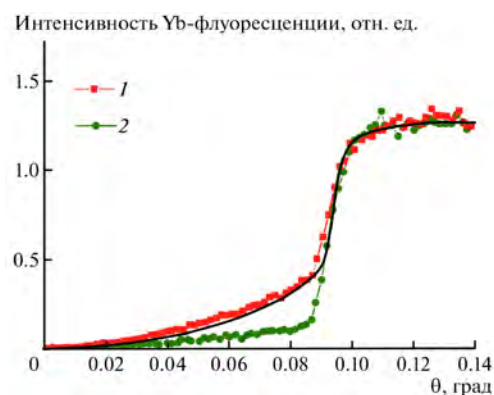
ствие ионов иттербия с фосфолипидным монослоем. Показано, что для фосфолипида с отрицательно заряженной гидрофильной головой, DPPG, формируется слой толщиной 10 Å на глубине 25 Å от границы раздела воздух-среда, обогащенный ионами иттербия в 2.5 раза по сравнению с раствором (рисунок 3.12 а). Сплошная линия – расчёт, наилучшее совпадение. Пунктирная линия – расчет для ситуации, когда атомы-источники флуоресценции присутствуют в слое толщиной 10 Å, расположенном на расстоянии 25 Å от границы раздела воздух/пленка. В то же время для фосфолипида с нейтральной гидрофильной головой подобного слоя не формируется (рисунок 3.12 б). Для сравнения на рисунке приведена экспериментальная угловая зависимость выхода Yb-флуоресценции от раствора соли $Yb(NO_3)_3 \cdot 5H_2O$ (кривая 2). Сплошная линия – расчёт, наилучшее совпадение.

Полученные экспериментальные данные, совместно с результатами исследований другими методами, позволяют сделать вывод о механизмах антимикробной активности препаратов, содержащих ионы редкоземельных элементов.

Г.М. Кузьмичева и др. «Антимикробная активность композиционных гидрогелей в системе поли-N-винилпирролидон- $RE(NO_3)_3 \cdot xH_2O$ (RE -ионы редкоземельных металлов).» Кристаллография 65.6 (2020): 921-932.



а)



б)

Рис. 3.12. Экспериментальные угловые зависимости выхода Yb-флуоресценции от монослоя: а) DPPG и б) DPPE, сформированных на поверхности раствора соли $Yb(NO_3)_3 \cdot 5H_2O$

Измерение пьезомодуля монокристалла методом дифракции синхротронного излучения на углы, близкие к π

Пьезокристаллы семейства лангасита обладает превосходными термическими, пьезоэлектрическими и диэлектрическими свойствами, а также устойчивы к химическим воздействиям. Данные кристаллы используются для изготовления фильтров, используемых в мобильных системах связи, в датчиках температуры, работающих на поверхностных акустических волнах и датчиках давления, вибрации, веса, работающих на прямом пьезоэффекте. Благодаря отсутствию пьезоэлектрического эффекта, гистерезиса свойств, отсутствию фазового перехода вплоть до температуры плавления (1470°C) и наличию термостабильных срезов кристаллы семейства лангасита используют в экстремальных условиях. Однако функциональные характеристики кристаллов отличаются от образца к образцу,

поэтому для разработки новых устройств требуется метод контроля свойств этих материалов.

Относительные деформации кристаллической решетки, возникающие в результате обратного пьезоэффекта, составляют сотые и тысячные доли процента, что делает определение пьезокоэффициентов с помощью методов классической дифрактометрии практически невозможным. На станции «EXAFS-D» Курчатовского источника синхротронного излучения была реализована прецизионная методика определения сверхмалых деформаций кристалла, основанная на дифракции рентгеновского излучения на углы, близкие к π . Данный метод характеризуется высокой точностью определения относительного изменения межплоскостного расстояния ($\Delta d/d \sim 10^{-7}$ при характерных значениях пьезоэлектрических деформаций $\sim 10^{-5}$), однако требует точной настройки энергии излучения, соответствующей геометрии обратной дифракции, что может быть реализовано только на синхротронном источнике.

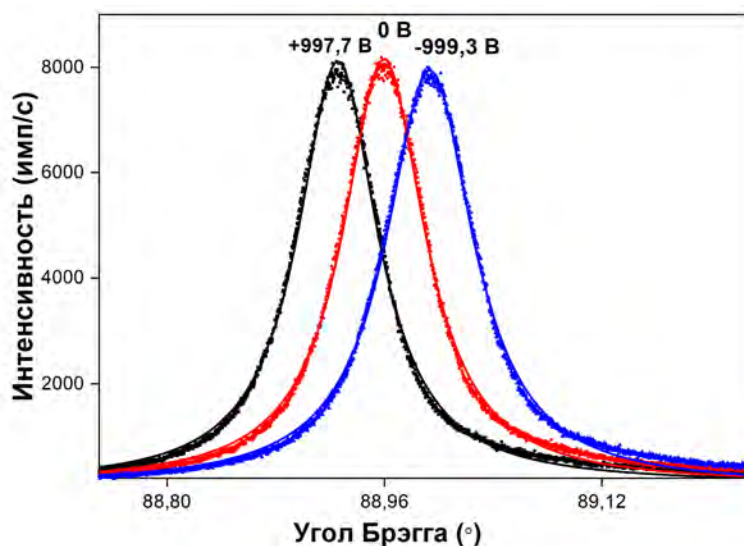


Рис. 3.13. Пример сдвига кривых дифракционного отражения кристалла ЛГС(770)

Так как дифракционные кривые пьезокристалла мало смещаются при подаче внешнего электрического поля, на станции «EXAFS-D» Курчатовского источника синхротронного излучения была разработана методика определения смещений дифракци-

онных линий с высокой точностью. Это достигается при дифракции на углы, близкие к π . Данный метод характеризуется высокой точностью определения относительного изменения межплоскостного расстояния $\Delta d/d \sim 10^{-7}$. Для обратного пьезоэффекта

характерны изменения параметра решетки $\Delta d/d \sim 10^{-5}$. Разработанный метод использован для определения пьезомодуля монокристалла лангасита ($La_3Ga_5SiO_{14}$, ЛГС). Получены значения пьезомодуля $|d_{11}| = (6.32 \pm 0.08) \times 10^{-12}$ S/N и $|d_{11}| = (6.53 \pm 0.08) \times 10^{-12}$ S/N для двух направлений электрического поля на кристалле. Полная относительная ошибка измерения состави-

ла 1.1%, что превосходит точность измерения пьезомодулей другими методами, встречающимся в литературе. Результат работы опубликован в статье: *P. V. Gureva et al, Measurement of single-crystal piezo modulus by the method of diffraction of synchrotron radiation at angles near π // J. Appl. Cryst. 2020, 53, P. 734-740.*

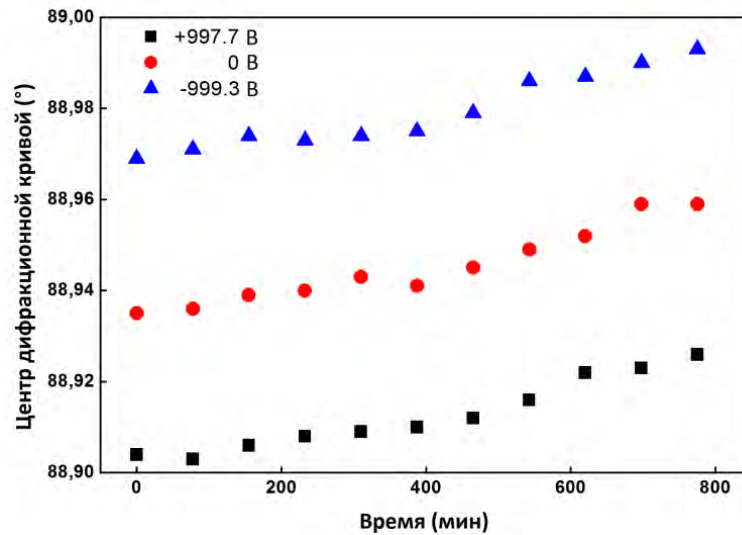


Рис. 3.14. Центры тяжести дифракционных кривых кристалла ЛГС(770). Ось X — астрономическое время измерений, ось Y — центры тяжести дифракционных картин. Треугольники — отрицательное напряжение на кристалле, кружки — нулевое напряжение, квадраты — положительное напряжение. Наблюдается дрейф положения дифракционного рефлекса во времени, связанный с нестабильностью температуры образца

«Двумерный» d_0 -образец для нейтронных исследований внутренних напряжений

Точность расчёта деформаций и внутренних напряжений в кристаллических образцах сильно зависит от точности определения параметра решётки d_0 материала в ненапряжённом состоянии. И если в однородных по своему составу образцах достаточно одного единственного значения параметра для определения напряжений в любой точке, то в неоднородных объектах для каждой экспериментальной точки необходимо своё значение d_0 (например, в сварном шве). Для определения сразу целого массива значений d_0 применяется образец-гребёнка, который представляет собой тонкую пластинку, аккуратно вырезанную из самого исследуемого объекта таким образом, чтобы её профиль повторял область измерений. Сама резка проводится как можно дальше от исследуемой области для того, чтобы это не вызвало в ней перераспределение остаточных напряжений. На следующем этапе для удаления остаточных напряжений в пластинке делается серия вертикальных

надрезов (рисунок 3.15, а). Однако экспериментально было показано, что напряжения могут частично сохраняться в вертикальных «зубьях» гребёнки, что, в свою очередь, снизит точность расчётов.

Для решения данной проблемы нами было предложено дополнительно наносить прорезы, перпендикулярные к основным надрезам. Так как прорезы выполняются не на всю толщину пластинки, она сохраняет свою целостность, и работа с ней не вызывает трудностей (рисунок 3.15, б). Сравнения значений d_0 в стандартном образце-гребёнке и «двумерном» d_0 -образце, которые были специально изготовлены из одного сварного шва, показывают более полную релаксацию остаточных напряжений в последнем (рисунок 3.16).

Таким образом, применение новой методики изготовления реперных d_0 -образцов позволяет обеспечить более высокую точность проводимых исследований.

I.D. Karpov et al. Two-directional stress-free comb sample for weld study by neutron diffraction // Journal of surface investigation: x-ray, synchrotron and neutron techniques. – 2020. – V. 14. – P. S82-S84.

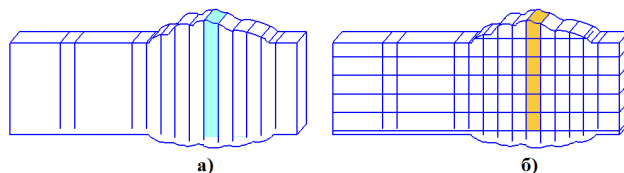


Рис. 3.15. а) Стандартный образец-гребёнка б) «двумерный» d_0 -образец. Цветом обозначен «зуб», по которому производилось сравнение значений d_0

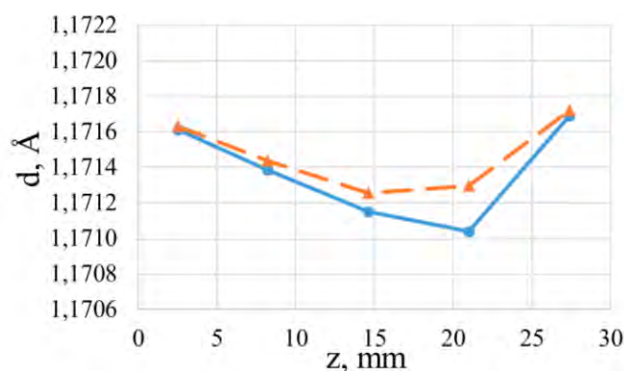


Рис. 3.16. Сравнение d_0 в стандартном образце-гребёнке (голубой) и в «двумерном» d_0 -образце (коричневый)

Структура дейтеридов

$(\text{ZrTi})_{0.5}(\text{VCrFe}(\text{Ni}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}))_{0.5}$ и $(\text{ZrTi})_{0.5}(\text{VMoFeNi})_{0.5}$

Высокоэнтропийные интерметаллиды $(\text{ZrTi})_{0.5}(\text{VCrFe}(\text{Ni}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}))_{0.5}$ и $(\text{ZrTi})_{0.5}(\text{VMoFeNi})_{0.5}$ имеют гексагональную решётку фаз Лавеса C14. Такие структуры могут обратимо поглощать значительные количества водорода и представляют интерес в качестве материалов для его хранения.

В результате реакции с дейтерием получены образцы, содержащие количество дейтерия, соответствующее составу 2.5 атомов дейтерия на формульную единицу интерметаллида для $(\text{ZrTi})_{0.5}(\text{VCrFe}(\text{Ni}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}))_{0.5}$ и 3.0 атомов дейтерия на формульную единицу интерметаллида для $(\text{ZrTi})_{0.5}(\text{VMoFeNi})_{0.5}$ при давлении дейтерия 1.5 МПа и комнатной температуре. Нейтронографические измерения проводили на станции «АТОС» реактора ИР-8.

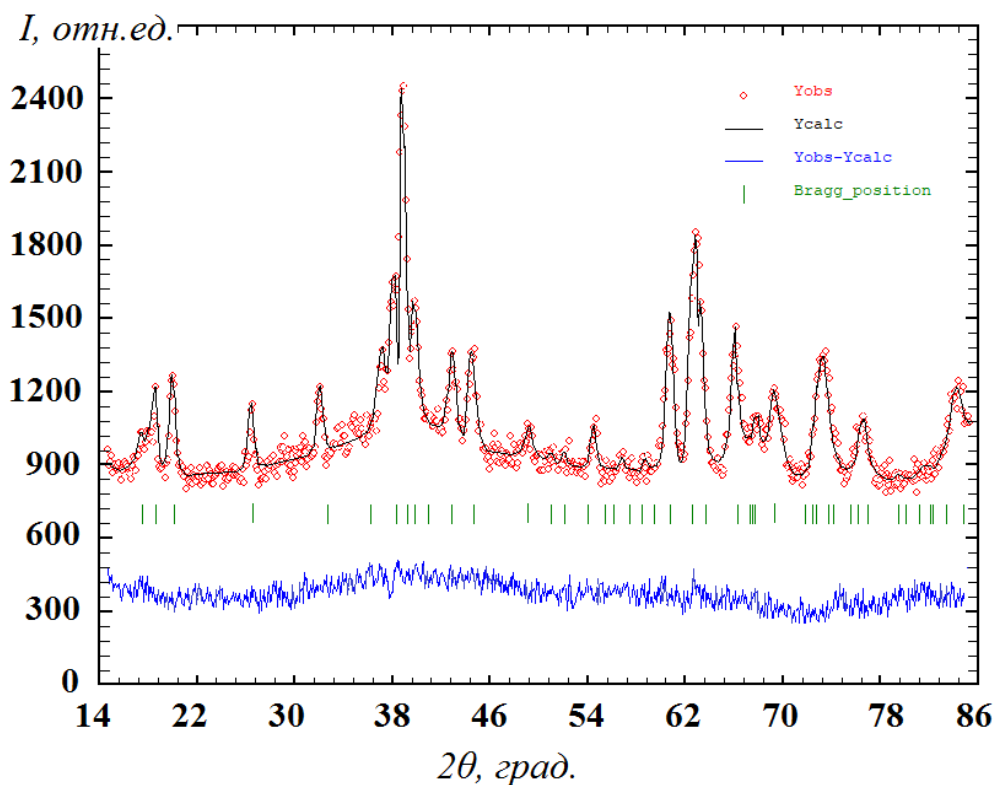


Рис. 3.17. Нейтронограмма $(\text{ZrTi})_{0.5}(\text{VCrFe}(\text{Ni}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}))_{0.5}\text{D}_{2.5}$, обработанная по методу Ритвельда. Штрихи соответствуют Брэгговским позициям фазы дейтерида, $R_w = 7.0\%$, красный — экспериментальные значения, чёрный — расчётные значения, синий — разница между экспериментальными и расчётными значениями

При обработке нейтронных данных уточняли структурные параметры атомов дейтерия. В результате расчёта было установлено, что в исследованных структурах атомы дейтерия занимают в основном два типа позиций $24l$ и $12k_2$. Позиции $6h_1$ и $6h_2$ заселены незначительно. При этом соотношение заселённости в позициях $24l$ и $12k_2$ примерно соответствует 2:1. Такое соотношение заселённости указывает на то,

что при заполнении этих позиций атомами дейтерия полного упорядочения дейтерия по этим позициям не происходит. Это подтверждается полученными данными — на нейтронограммах дейтеридов присутствует слабо выраженное гало (рисунок 3.17), указывающее на то, что дейтерий находится в неупорядоченном состоянии.

Для хорошо изученных гидридов интерметаллических соединений установлено,

что такое последовательное заполнение позиций в структуре вызвано наличием ближнего порядка («блокированием») в расположении атомов водорода. Согласно экспериментальным данным, полученным ранее, «блокирование» определяется радиусом, который в различных гидридах соответствует среднему значению 0.2 нм и колеблется в диапазоне 0.18-0.22 нм. Этот радиус зависит от периодов решётки сплава или интерметаллида, позиционных параметров и изменяется в зависимости от концентрации водорода. При этом одноподрешётчное заполнение дейтерием вероятно только при больших радиусах «блокирования», в решётках

с малым периодом и низкой концентрации водорода. В остальных случаях возможно многоподрешётчное заполнение позиций в металлической матрице. Полученные экспериментальные данные по вероятности заполнения позиций подтверждают влияние эффекта «блокирования» на распределение атомов дейтерия в металлической подрешётке $(ZrTi)_{0.5}(VCrFe(Ni_{0.9}Cu_{0.1}))_{0.5}D_{2.5}$ и $(ZrTi)_{0.5}(VMoFeNi)_{0.5}D_{3.0}$.

Sobko M.A. et al. Structure of $(ZrTi)_{0.5}(VCrFe(Ni_{0.9}Cu_{0.1}))_{0.5}$ and $(ZrTi)_{0.5}(VMoFeNi)_{0.5}$ Based Deuterides. // Inorganic Materials. – 2020. – Vol. 56. – No. 11. – P. 1106-1112.

Фазовые превращения при высоких давлениях и высоких температурах в фуллерене C_{60} с добавками металлов

Несмотря на большое число исследований взаимодействия фуллеренов с металлами, структуры и свойств металл-матричных композиционных наноматериалов с фуллеренами, ряд вопросов изучен явно недостаточно. Это в первую очередь касается исследования фазовых превращений в фуллеренах, входящих в состав композитов. В частности, в металл-матричных композиционных наноматериалах с фуллеренами такие исследования в основном проведены с малым содержанием фуллеренов (1–5 объёмных %), что затрудняет исследование фазовых превращений в них при термобарическом воздействии, в том числе при изготовлении композитов в условиях высоких температур и высоких давлений.

В настоящей работе методом дифракции нейтронов исследованы фазовые превращения при высоких температурах (до 1100°C) и высоких давлениях (2 и 8 ГПа) в «аморфном» и кристаллическом фуллерене C_{60} с небольшими концентрациями (~ 7 ат.%) кристаллических металлов – Al и Fe (рисунок 3.18 и рисунок 3.19).

В результате проведённых исследований по-

казано, что:

1. Введение в «аморфный» и кристаллический фуллерен C_{60} алюминия и железа не изменяет известную температурную последовательность фазовых превращений при высоких температурах и высоких давлениях: кристаллический (или «аморфный») фуллерен $\rightarrow$ разориентированный графит $\rightarrow$ кристаллический графит.
2. Введение в кристаллический фуллерен C_{60} алюминия и железа сильно повышает его термическую устойчивость и увеличивает температуру его превращения в разориентированный графит. В «аморфном» фуллерене подобный эффект не наблюдается из-за компенсации воздействия легирования снижением устойчивости фуллерена из-за искажений, создаваемых предварительной механоактивацией.
3. Не обнаружено принципиальной разницы во влиянии Al и Fe на фазовые превращения в фуллерене C_{60} при высоких температурах и высоких давлениях. Результаты исследований могут быть использованы при поиске новых путей синтеза композитов на основе фуллеренов, легированных металлами, с заданными структурой и свойствами.

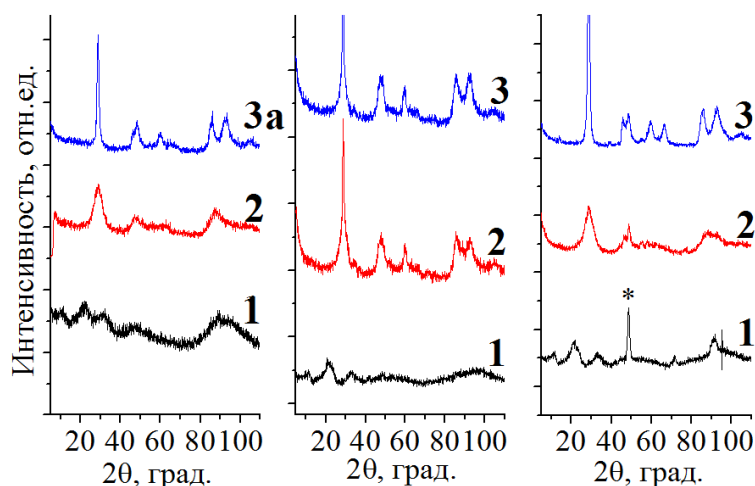


Рис. 3.18. Дифракционные нейтронные спектры фаз, полученных при синтезе образцов «аморфного фуллерена» C_{60} при давлении 8 ГПа и температурах, $^{\circ}\text{C}$: 500 (1), 800 (2) и 1100 (3) и 1050 (3а). Звездочка отмечает сильнейшую линию (110) ОЦК Fe

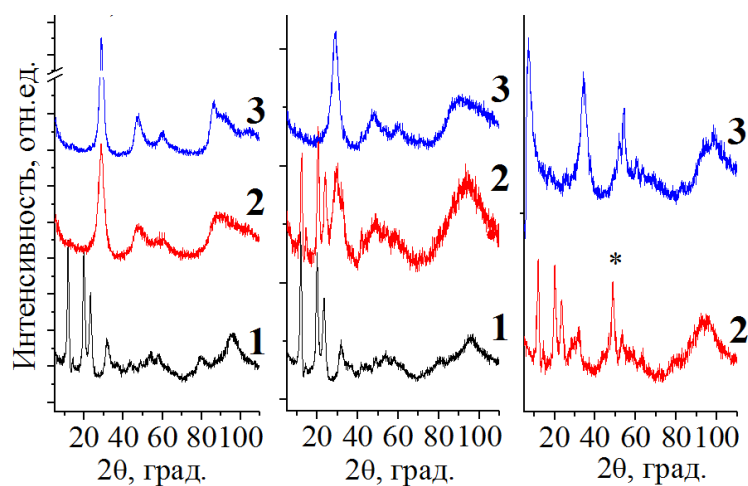


Рис. 3.19. Дифракционные нейтронные спектры фаз, полученных при синтезе образцов кристаллического фуллерена C_{60} при давлении 8 ГПа и температурах, °С: 500 (1), 800 (2) и 1100 (3). Звёздочка отмечает сильнейшую линию (110) ОЦК Fe

P. A. Borisova et al Phase Transformations in C_{60} Fullerene with Iron and Aluminum at High Pressures and Temperatures // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2020. V. 84. №. 7. pp. 851–856.

Томографические исследования терракотовой головы из Керченской бухты

Представлены результаты томографического исследования в НИЦ «Курчатовский институт» античной терракоты, изготовленной в виде головы бородатого мужчины и найденной при строительстве опор Крымского моста при подводных работах Института археологии РАН. С помощью методов нейтронной и рентгеновской томографии на основании анализа выявленных технологических швов установлено, что изделие изготовлено преимущественно методом скульптурной лепки с последовательным добавлением профильных деталей (слоя прически, носа, век, глаз, ушей, носогубной складки, бороды) к глиняной основе. Все исследования проводили неразрушающими методами, позволившими провести мониторинг скрытых полостей, которые в дальнейшем могут представлять угрозу для сохранности ценного объекта культурного наследия.

Основное внимание уделено вопросам технологии изготовления изделия, о которой можно судить по форме и расположе-

нию многочисленных пустот, обнаруженных в глиняном тесте.

На томографических срезах заметен свинцовый наплыв (рисунок 3.20, а), расположенный на внутренней поверхности изделия, и наблюдаются отдельные свинцовые капли. Форма этого наплыва определена с помощью нейтронной томографии. Этим же методом на поверхности изделия выявлено водородсодержащее вещество – смола, следы которой сохранились в волосах, усах, бороде, ноздрях и межгубной щели (рисунок 3.20, а).

Наличие на внутренней поверхности терракоты свинцового наплыва позволяет предположить, что в скульптуре существовала свинцовая стяжка для крепления изделия к неизвестной основе, расположенной под головой (рисунок 3.20). Несмотря на указанные наблюдения, достоверно установить, являлось ли изделие частью скульптуры или отдельным элементом, пока не удалось.

М. В. Ковальчук и др. Томографические исследования терракотовой головы из Керченской бухты // Кристаллография. – 2020. – Т. 65. – №. 5. – С. 832-838.

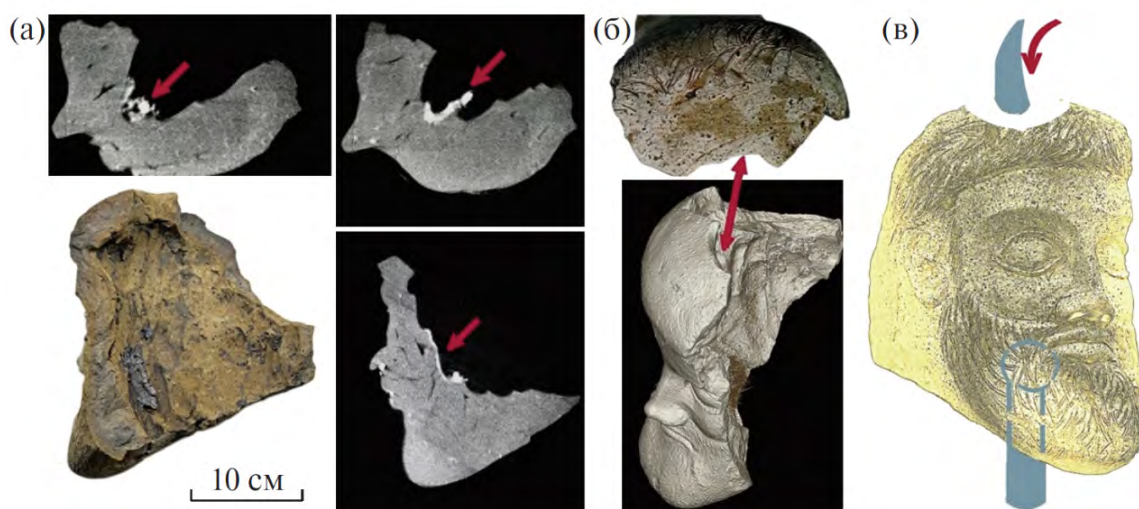


Рис. 3.20. Фотографии и томографические нейтронные срезы фрагментов свинца, стрелками обозначен свинцовый натек, на нейтронных томографических срезах свинец и смола выделяются светлым цветом (а); фотография фрагмента теменного отверстия и 3D-модель терракоты, стрелками обозначено округлое отверстие (б); реконструкция крепления терракоты: предполагаемая свинцовая стяжка (серый цвет) и процесс ее заливки через теменное отверстие (в)

Изучение бронзовой подвески-колта XII–XIII вв. методами синхротронной и нейтронной томографии

Проведено исследование бронзовой подвески-колта из Суздальского Ополя, датированной XII–XIII в. Подвеска с двух сторон покрыта многоцветным эмаlevым покрытием (рис. 3.21 (1)). Целью исследования являлась реконструкция авторских приемов изготовления подвески, а также оценка сохранности металлической основы и эмаlevого слоя с применением неразрушающих методов. Сочетание нейтронной (установка ДРАКОН, реактор ИР-8) и синхротронной (станция ЛИГА, Курчатовский источ-

ник синхротронного излучения) томографии позволило получить взаимодополняющую картину внутреннего строения эмаlevых слоев иконки на двух типах излучения (рис. 3.21 (2)), а строение бронзовой подложки было изучено с помощью нейтронной томографии (рис. 3.22). В результате исследований установлено, что изображения выполнены перегородчатой техникой. Перегородки изготовлены из полосок фольги толщиной около 150 мкм, как правило, они проникают на всю глубину эмаlevого слоя. Изучена конструкция колта, сохранность створок и качество литья, определены форма и толщины эмаlevых слоев на лицевой и оборотной сторонах (0.9–1.4 мм), а для некоторых декоративных элементов выявлена многослойность изготовления.

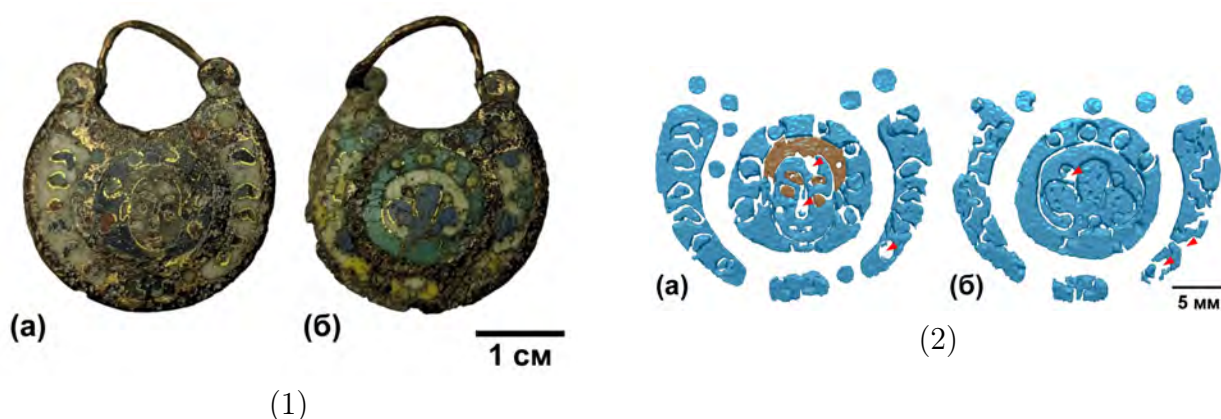


Рис. 3.21. (1) Фотография бронзовой подвески-колта, с двух сторон украшенной многоцветной эмалью: (а) – лицевая сторона; (б) – оборотная сторона; (2) объёмное представление эмаlevых слоев лицевой (а) и оборотной (б) створок, стрелками отмечены некоторые утраченные элементы декора

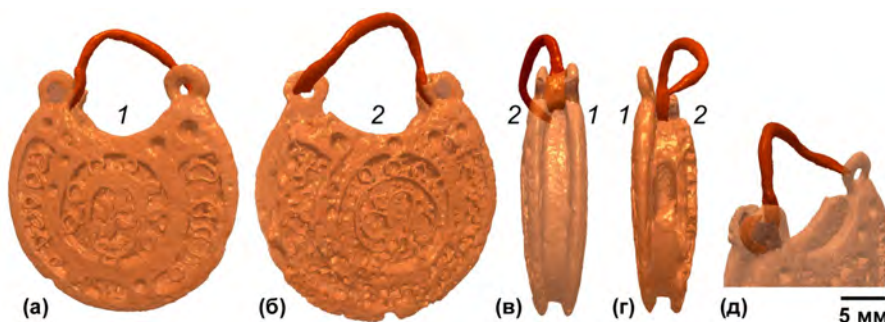


Рис. 3.22. Объёмное представление металлических деталей подвески-колта: (а) – вид со стороны лицевой створки 1, (б) – вид со стороны оборотной створки 2, (в, г) – виды обеих створок сбоку, (д) – конструкция ушка

Глава 4

Концепция модернизации накопительного кольца и инжекционного комплекса источника КИСИ



(а)



(б)

Рис. 4.1. Накопитель КИСИ: а) инжекционный промежуток, б) резонаторная секция

4.1. Введение

Действующий Курчатовский источник синхротронного излучения состоит из основного накопительного кольца на энергию 2.5 ГэВ с эмиттансом электронного пучка 98 нм·рад, бустерного синхротрона на энергию 450 МэВ и линейного ускорителя на энергию 80 МэВ. Ускорительно-накопительный комплекс в нынешней конфигурации и с существующими параметрами работает уже более 25 лет. Его модернизация предусматривает создание нового источника СИ на энергию электронов 2.5 ГэВ для работы в непрерывном режиме с длительными заходами, полную замену магнитной оптики, вакуумной системы и всех технологических систем. Основную задачу модернизации составляет получение натурального эмиттанса на уровне 2–4 нм·рад, что меньше в 40–50 раз горизонтального эмиттанса действующего в настоящее время основного накопителя «КИСИ-Курчатов» при сохранении работоспособности всех экспериментальных станций.

Для решения этой задачи требуется создание новой магнито-оптической структуры с малыми поперечными фазовыми объемами (эмиттансами) электронного пучка (натураль-

ным эмиттансом $\sim 1 \div 5$ нм·рад) для основного накопителя – источника СИ. Особенности магнито-оптических структур с малым натуральным эмиттансом является большой хроматизм и, как следствие его необходимой компенсации секступольными полями, а также малые динамические апертуры. Расширение спектральных возможностей излучения из накопителя путём постановки в прямолинейные промежутки сверхпроводящих многополюсных устройств с малым межполюсным зазором дополнительно ограничивает апертуру. Следствием малой апертуры в новом источнике СИ может быть существенное уменьшение эффективности инжекции выпускаемого из бустерного синхротрона электронного пучка с большим натуральным эмиттансом.

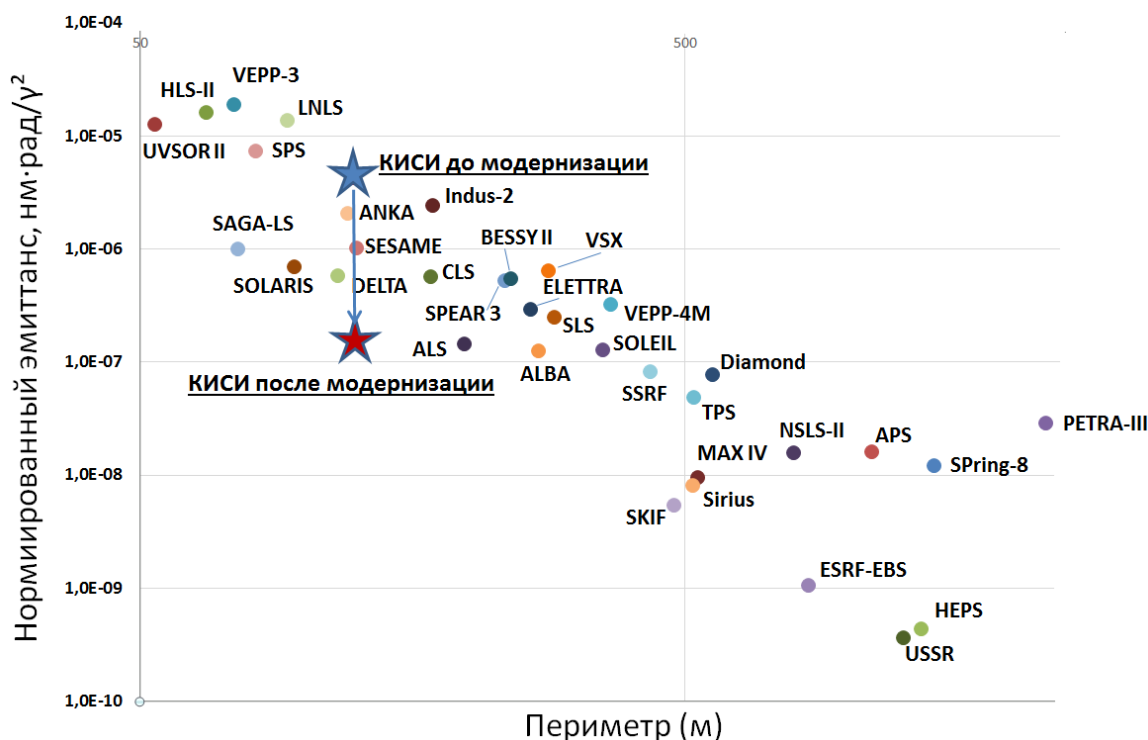


Рис. 4.2. Зависимость нормированного эмиттанса от периметра накопительного кольца

Необходимость обеспечения долговременной пространственной и временной стабильности фотонных пучков диктует высокие требования к температурной стабилизации основного кольца ($\pm 0.10^\circ\text{C}$), которые можно достичь при неизменных токах в магнитных элементах и параметрах ускоряющей высокочастотной (далее – ВЧ) структуры, т.е. при работе накопителя на одном уровне энергии.

Необходимым условием достижения высоких параметров фотонных пучков (поток и яркости СИ) является создание нового бустерного синхротрона (далее – БС), работающего в диапазоне энергий электронных пучков 0.2-2.5 ГэВ и нового линейного ускорителя-преинжектора в БС с энергией электронов 200 МэВ.

Максимальный импульсный ток ускоренного до 200 МэВ пучка на выходе линейного ускорителя электронов (далее – ЛУЭ) должен составлять не менее 750 мА (без учета потерь). Для эффективной инжекции в бустер необходимо минимизировать энергетический спектр пучка, а также получить на выходе ЛУЭ приемлемую величину поперечного эмиттанса, не превышающую нескольких нм·рад.

Кроме того, при инжекции на полной энергии и периодическом «подкоплении» электронного пучка в основном накопителе появляется возможность проведения экспериментов на синхротронном излучении без перерывов на повторное накопление электронов и подъём энергии при сохранении интенсивности излучения во времени с точностью до одного процента.

Указанные обстоятельства (ограничения) не позволяют использовать ныне действующий инжекционный комплекс, состоящий из бустерного синхротрона с эмиттансом выпускаемого электронного пучка 800 нм·рад и энергией 450 МэВ и линейного ускорителя на энергию 80 МэВ, для основного накопителя – источника СИ с новой магнито-оптической структурой.

Надёжную и стабильную работу модернизированного основного накопителя обеспечит вновь созданный инжекционный комплекс, состоящий из линейного ускорителя электронов с энергией 200 МэВ, бустерного синхротрона на энергию электронов 200–2500 МэВ и электронно-оптические каналы (ЭОК) перепуска пучков при инжекции в БС и БН – ЭОК-1 и ЭОК-2. Ниже дано краткое описание инжекционного комплекса на этапе разработки в 2020 г.

4.1.1. Ожидаемые параметры синхротрона КИСИ после модернизации

В результате модернизации «КИСИ-Курчатов» будет уменьшен натуральный горизонтальный эмиттанс электронного пучка со 100 нм·рад до 2–5 нм·рад, что при том же токе электронов и интегральной интенсивности СИ приведёт к увеличению яркости синхротронного излучения из поворотных магнитов приблизительно в пятьсот раз.

Текущая магнитная структура Курчатовского источника синхротронного излучения – модифицированная структура типа double bend achromat (DBA). При модернизации структура будет заменена на более совершенную структуру типа multi bend achromat (МВА). При разработке новой магнитной структуры Курчатовского источника синхротронного излучения было поставлено условие сохранения всех существующих экспериментальных станций и, соответственно, всех точек излучения из поворотных магнитов; сохранение спектрального диапазона излучения; сохранение количества, длин и положений прямолинейных промежутков с нулевой дисперсионной функцией; сохранение периметра накопителя; возможность инжекции электронного пучка из бустерного синхротрона; приемлемое время жизни электронного пучка.

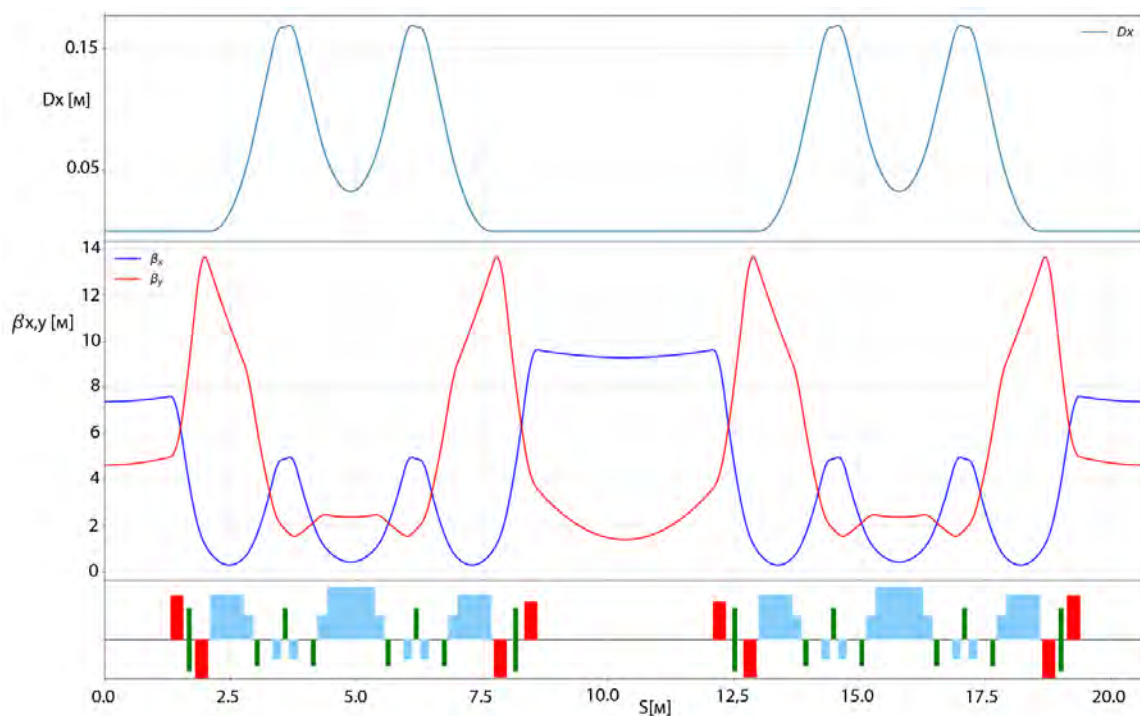


Рис. 4.3. Оптические функции модернизированного ускорителя и его магнитная структура

Новая магнитная структура обеспечивает значение эмиттанса электронного пучка на уровне 2-5 нм·рад, сохранение положений каналов вывода синхротронного излучения из поворотных магнитов. В новой магнитной структуре длина промежутка для постановки сверхпроводящих вигглеров увеличена с 3 м до 3.5 м, а длина промежутка, предназначенного для инжекции электронного пучка уменьшилась с 3 м до 2.6 м. Такое перераспределение длин прямолинейных промежутков – это плата за значительное уменьшение эмиттанса. Тем не менее длины промежутка 2.6 м будет вполне достаточно для постановки вставных устройств, подобных тем, что установлены на основном накопителе в настоящее время. Сравнение расположения и типов магнитных элементов новой и действующей структур на длине одного суперпериода приведено на рисунке 4.4.

Один из прямолинейных промежутков будет предназначен для установки устройств диагностики электронного пучка. В нем будут установлены: дополнительный датчик положения пучка и пластины раскачки горизонтальных и вертикальных когерентных колебаний для измерения бетатронных частот; датчик полного тока; быстрый датчик тока, предназначенный для получения информации об амплитуде тока и временной структуре сгустков; система подавления когерентных синхротронных и бетатронных колебаний, состоящая из датчика положения пучка, двух поперечных и одного продольного кикеров; один из каналов вывода синхротронного излучения из поворотных магнитов будет использован для станции оптической диагностики электронного пучка. Для контроля размеров электронного пучка и его положения в каждом суперпериоде будут установлены по два люминофорных пробника с цифровыми видеокамерами.

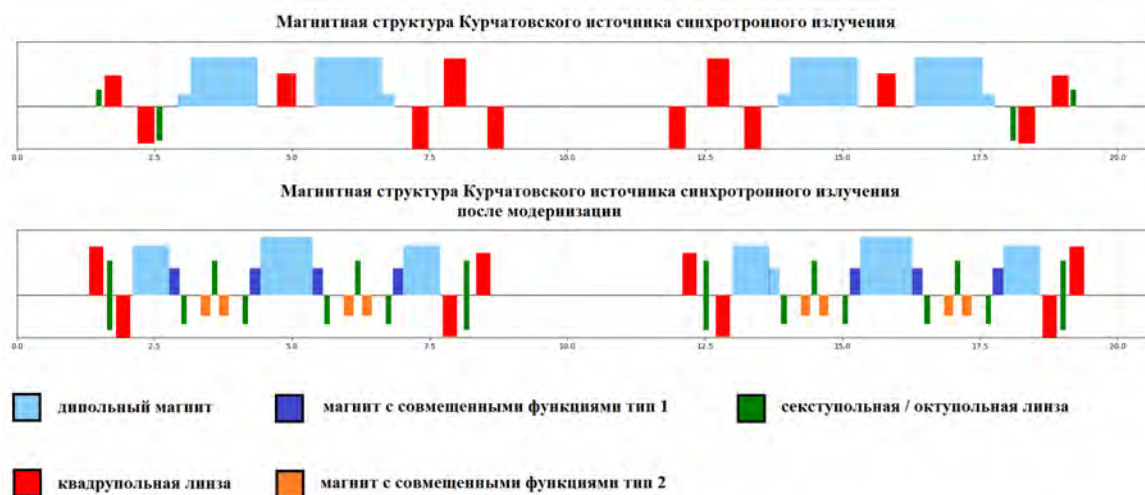


Рис. 4.4. Действующая (сверху) и модернизированная (снизу) магнитная структура Курчатовского источника синхротронного излучения

Основные параметры модернизированного «КИСИ-Курчатов» приведены в таблице 4.1.

Таблица 4.1. Сравнение параметров «КИСИ-Курчатов» до и после модернизации

Параметр	в настоящее время	после модернизации
Энергия	2.5 ГэВ	
Ток	200 мА	
Периметр	124.13 м	124.11-124.15 м
Эмиттанс, ε_x	98 нм·рад	2-5 нм·рад
Коэффициент связи, k	1-5 %	1-100 %
Время жизни	15 ч	∞ ч
Кол-во суперпериодов	6	
Частота ВЧ	181 МГц	
Кратность ВЧ	75	
Кол-во промежутков для вставных устройств	до 5 вигглеров и до 4 ондуляторов	до 9 вигглеров или 9 ондуляторов
Общее количество экспериментальных станций	до 24 из ПМ до 9 из ID	до 36 из ПМ до 9 из ID
Тип магнитной структуры	мод. DBA	мод. MBA
Энергия инжекции	0.45 ГэВ	2.5 ГэВ
Размер динамической апертуры	25 мм	5-15 мм

4.2. Размеры источника после модернизации

Модернизация «КИСИ-Курчатов» нацелена на качественное улучшение характеристик генерируемого источником излучения. Полная замена элементов и систем ускорительно-накопительного комплекса «КИСИ-Курчатов» обеспечит улучшение горизонтального эмиттанса электронного пучка практически в 50 раз – до величины около 2 нм·рад, что делает существующую установку источником третьего поколения. Помимо этого, увеличение максимальной энергии бустерного накопителя от 450 МэВ до 2.5 ГэВ за счёт замены его магнитной структуры и увеличения длины его окружности, сделает возможным инжекцию в большой накопитель на полной энергии, обеспечит высокую стабильность положения пучка синхротронного излучения и по сути сделает бесконечным время жизни пучка, что необходимо для проведения длительных экспериментов на слабо рассеивающих (например, биологических) объектах.

Проведены оценки основных характеристик электронного сгустка – размера и расходимости, а также результирующих размеров источника фотонов.

Таблица 4.2. Оценка размеров источника после модернизации

Параметр	Поворотный магнит	Прямолинейный промежуток
Размеры сгустка электронов $\sigma_x \times \sigma_y$	45×6.3 мкм	140×6.3 мкм
Расходимость электронного пучка $\sigma'_x \times \sigma'_y$	45×3.3 мкрад	15×3.2 мкрад

4.3. План развития ускорительно-накопительного комплекса

Модернизация «КИСИ-Курчатов» будет выполняться с полной заменой узлов и систем ускорительно-накопительного комплекса. В рамках технического перевооружения «КИСИ-Курчатов» одновременно будут созданы и введены в эксплуатацию:

- новый линейный ускоритель – преинжектор для синхротрона-бустера с выходной энергией электронов 200 МэВ ;
- транспортный электронно-оптический канал (ЭОК-1) для инжекции электронов с энергией 200 МэВ из линейного ускорителя в бустер;
- новый синхротрон-бустер для инжекции электронов в основное кольцо на рабочей энергии 2.5 ГэВ (так называемая «Top-UP инжекция»);
- транспортный электронно-оптический канал (ЭОК-2) для инжекции электронов с энергией 2.5 ГэВ из бустерного синхротрона в накопительное кольцо КИСИ-2;
- новое накопительное кольцо (КИСИ-2) на энергию 2.5 ГэВ с горизонтальным эмиттансом электронов 2-5 нм·рад.

4.4. Новый инжекционный комплекс

4.4.1. Линейный ускоритель

Для инжекции в бустерный синхротрон (БС) «КИСИ-Курчатов» предполагается построить новый линейный ускоритель электронов (ЛУЭ) на энергию около 200 МэВ. Для эффективной инжекции в БС необходимо минимизировать энергетический разброс пучка на выходе ЛУЭ, а также получить в ЛУЭ приемлемую величину поперечного эмиттанта, не превышающую нескольких мм·мрад. В качестве источника электронов создаваемого ЛУЭ предлагается использовать трехэлектродную (катод-управляющая сетка – анод) пушку с полым заземлённым анодом и изолированным оксидным накальным катодом, на который подаётся высоковольтный импульс.

Предварительные расчёты динамики пучка в ЛУЭ показали, что для получения максимального коэффициента захвата в режим ускорения (до 70–75 %), оптимальной энергией инжекции электронов из пушки будет 100–120 кэВ. Исходя из этих расчетов, были сформулированы требования к электронному пучку на выходе пушки: энергия пучка 100 кэВ, ток пучка 0.7–1.5 А, радиус пучка 3.5–5 мм, эмиттанс не более 10π (см·мрад).

В качестве источника электронов планируется использовать классическую трёхэлектродную пушку с оксидным подогреваемым катодом (с питанием от отдельного модулятора). Результаты моделирования динамики пучка показывают, что оптимальной энергией инжекции будет 100–120 кэВ. В этом случае коэффициент захвата в режим ускорения можно довести до 70–75 %.

Перед первой регулярной секцией будет размещён адиабатический группирователь, в составе которого будет несколько (4–7) нерегулярных ускоряющих ячеек с нарастающими фазовой скоростью волны и амплитудой ускоряющего поля для продольной группировки пучка. Энергия пучка на выходе этой секции будет составлять около 10 МэВ.

Для повышения коэффициента захвата частиц в режим ускорения и уменьшения ширины энергетического спектра пучка электронов (на выходе ЛУЭ) перед адиабатическим группирователем размещается дополнительно одно- или двух-зазорный группирователь

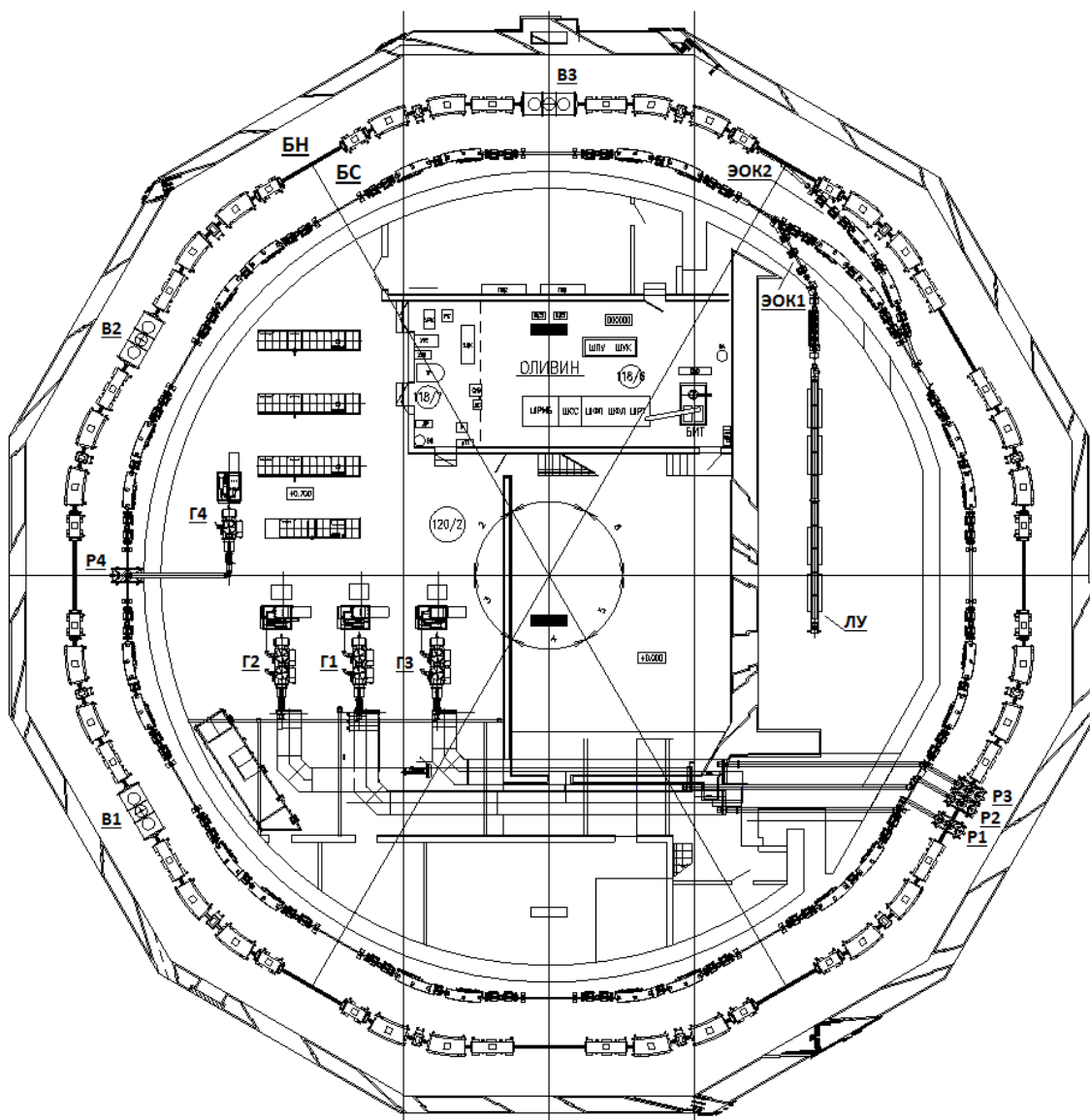


Рис. 4.5. Общий план размещения линейного ускорителя и бустерного синхротрона. БН – большой накопитель, БС – бустерный синхротрон, ЛУ – линейный ускоритель, ЭОК1 и ЭОК2 – каналы перепуска, Г1-4 – ВЧ-генераторы, П1-3 – ВЧ-резонаторы БН, П4 – ВЧ-резонатор БС, ОЛИВИН – станция питания ЛУ, В1-3 – вигглеры

(т.н. клистронный группирователь). Клистронный группирователь работает на частоте, уменьшенной в два или в четыре раза по сравнению с рабочей частотой регулярных секций.

ЛУЭ будет включать в себя: четыре ускоряющих секции. В качестве основного варианта регулярной секции предлагается бипериодическая ускоряющая структура (БУС), работающая на стоячей волне напряжения, длина ускоряющей секции 2.4 м, темп ускорения 25–30 МэВ/м (причины выбора БУС рассмотрены ниже). Основные параметры ЛУЭ с энергией электронов 200 МэВ приведены в Таблице 4.3.

Таблица 4.3. Основные параметры ЛУЭ 200 МэВ

Ускоряющая структура ЛУЭ	Стоячая волна
Рабочая частота	2797 МГц
Темп ускорения, рабочий режим 200 МэВ	25-30 МэВ/м
Длина регулярной секции (с вводом мощности)	2.30 м
Длина ЛУ (4 рег. секций – 200 МэВ, группирователь, клистронный группирователь)	~ 11.4 м.
Импульс тока пучка из 3-х электродной пушки (с учетом потерь)	~3.5 А
Энергия электронов на выходе из пушки	100-120 кэВ
Энергия инжекции в ЛУ (после группирователя пучка)	~10.3 МэВ
Длительность тока из ЛУЭ	5.5-370 нс
Частота рабочего цикла	1 Гц

СВЧ-питание ЛУЭ состоит из маломощной части – т.н. модулятора с системой синхронизации, и мощного выходного каскада на базе мощного импульсного усилительного клистрона и СВЧ-тракта.

Питание четырех регулярных секций будет осуществляться независимо от четырех мощных клистронов синхронизированных от одного задающего СВЧ-генератора. Предполагается использовать клистроны КИУ-53А (рабочая частота 2797,0 МГц, 20 МВт, 8 мкс), производство которых в настоящее время возобновляется в «ООО «Торий»» (г. Москва).

В качестве предварительного каскада усиления для клистронов КИУ-53А можно будет использовать клистрон меньшей импульсной мощности типа КИУ-37 (100 кВт), разработанный и производимый НПП «Исток» (г. Фрязино), или импульсный магнетрон, или твердотельный генератор.

В качестве задающего генератора для раскачки предварительного каскада усиления будет использован стандартный высокостабильный СВЧ-генератор нужного диапазона частот из линейки, представленной на рынке. Регулировка фазы ВЧ-поля будет осуществляться на низком уровне мощности в цепи задающего генератора.

Варианты системы питания – рассматривается секция с симметричным вводом мощности, работающая на стоячей волне напряжения с частотой 2797 МГц.

Высоковольтный импульсный модулятор (100 кВ/370 нс) питания трехэлектродной электронной пушки располагается в зале малого накопителя на расстоянии не более 2 м от пушки ЛУЭ. От него по специальному кабелю в режиме бегущей волны импульс с напряжением 100–120 кВ передается на катод трехэлектродной пушки. Амплитуда и длительность импульсов тока пушки определяется вариацией напряжения смещения на управляющем электроде пушки, создаваемом отдельным управляемым импульсным источником.

Для всей системы СВЧ-питания ЛУЭ потребуется шесть импульсных модуляторов: четыре модулятора для мощных клистронов, питающих основные секции, один маломощный модулятор для клистронного группирователя и один модулятор для электронной пушки. Это потребует создания системы управления и контроля ЛУЭ и, как важную составляющую, систему синхронизации и взаимной фазировки работы выходных импульсных СВЧ-клистронов и волноводных секций.

Продолжаются завершающие расчеты электродинамических характеристик и по оптимизации геометрических параметров адиабатического группирователя на рабочей частоте 2797 МГц, расчёт полной регулярной секции состоящей из 40 ячеек с вводом мощности и подстройки ввода на требуемый КСВ. Также будет продолжена оптимизация,

направленная на уменьшение коэффициента перенапряжения по электрическому полю.

В зависимости от моды работы источника СИ (одноразовый режим, многоразовый режим, выборочное заполнение сепаратрис сгустками электронов) требуемая длительность токового импульса из ЛУЭ при инжекции в бустерный синхротрон будет находиться в пределах 5.5 – 370 нс. Это много меньше, чем время заполнения ускоряющей структуры ЛУЭ электромагнитным полем (1.3–1.5 мкс). Поэтому импульсная работа ЛУЭ в режиме стоячей волны на частоте 1 Гц на запасённой энергии выглядит предпочтительнее, чем работа в режиме бегущей волны.

Для получения пучка высокого качества при энергии электронов до 200 МэВ необходимо использовать поперечную фокусировку магнитными соленоидами. Таким образом, оба группирователя и все регулярные секции ЛУЭ необходимо поместить в соленоиды с магнитным полем 0,03 Тл.

Принято, что в связи с ограниченным пространством для размещения длина ЛУЭ не должна превышать 12 м, при этом энергия электронов ЛУЭ будет ограничена 200 (250) МэВ. Структура ЛУЭ, включающая трехэлектродную электронную пушку с термокатодом, клистронный группирователь, предгруппирователь и 4 базовые ускоряющие секции, располагается в зале МН на оси, вдоль которой в настоящее время установлен преинжектор ЛУЭ на 80 МэВ.

Блок задающего высокостабильного СВЧ-генератора находится в радио-пультовой. Он работает на все СВЧ-станции одновременно. Блоки модуляторов для раскачки выходных клистронов с фазовращателями и блоки импульсных трансформаторов с выходными клистронами будут расположены в ряд параллельно оси ЛУЭ за стеной биозащиты в зале ВУФ (вакуумного ультрафиолета) малого накопителя.

Продолжается моделирование динамики электронного пучка в ЛУЭ. Проведённые расчёты динамики пучка электронов с участием термоионной пушки, клистронного группирователя, адиабатического группирователя и четырёх секции длиной примерно 2,1 м каждая, работающих на стоячей волне, показывают, что для получения максимального коэффициента захвата электронов в ЛУЭ в режим ускорения (до 70–75 %), оптимальная энергия выпускаемых электронов из пушки должна быть 100–120 кэВ. Исходя из этих расчётов, сформулированы требования к электронному пучку на выходе пушки: энергия пучка 100 кэВ, ток пучка 0.7–1.5 А, радиус пучка 3.5–5 мм, эмиттанс не более 10π (мкм·мрад).

Полагается, что вне зависимости от распределения электронов по сепаратрисам в БС, полный ускоряемый заряд не превышает 3.7–5.55 нКл. При среднем токе 10 мА в БС (период обращения 370 нс), работающем в режиме одного сгустка, на выходе ЛУЭ требуется иметь импульс со средним током 670 мА и длительностью 5.52 нс. С учетом общего «front-to-end» коэффициента токопрохождения пучка, составляющего около 55 %, режим работы пушки должен обеспечивать максимальный ток эмиссии на уровне 1.3 (2.0) А, что вполне достаточно. Таким образом, имеется полуторакратный запас ($\sim 3A$, см. Таблицу 4.3) для инжекции в бустер и основной накопитель, рабочий ток в котором должен составлять 200 мА.

Многоразовые режимы в БС с точки зрения необходимой эмиссии электронов пушки и формирования пучка на выходе ЛУЭ с малым эмиттансом и энергетическим разбросом более просты, но требуют, при сохранении заряда, более длинных импульсов и, соответственно меньших средних токов ЛУЭ. То есть требуется система управления амплитудой и длительностью тока пушки.

4.4.2. Бустерный синхротрон источника СИ

Магнитная структура БС

Новый бустерный синхротрон основан на модифицированной магнито-оптической структуре Часмана-Грина. Кольцо бустера состоит из 12 суперпериодов. Каждый суперпериод содержит по два поворотных магнита, по пять квадрупольных линз (два семейства) и по четыре секступольные линзы (два семейства) для коррекции натурального хроматизма. Общее число магнитных элементов составляет 24 дипольных магнита, 60 квадрупольных магнитов, 48 секступольных магнитов. Дополнительно, предполагается постанова 24 корректирующих магнитов для коррекции замкнутой орбиты. Кольцо бустера имеет 12 прямолинейных промежутков длиной порядка 2 м. Два из них предназначены для размещения устройств инжекции и экстракции пучка соответствующих каналов перепуска из линейного ускорителя в бустерный синхротрон и из бустерного синхротрона в основной накопитель. Один промежуток предназначен для размещения ускоряющего ВЧ-резонатора. Остальные промежутки свободны для размещения оборудования диагностики пучка. Магнито-оптическая структура и оптические функции изображены на рисунке 4.6.

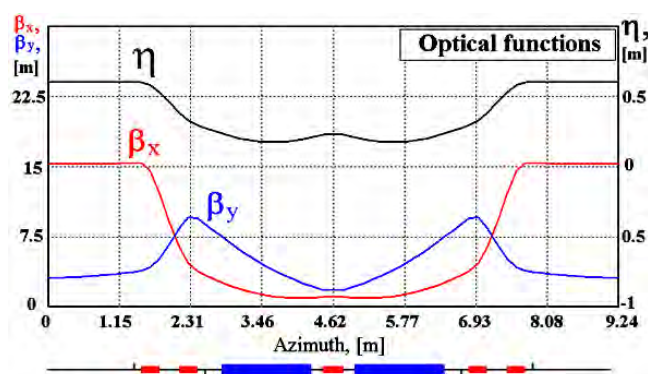


Рис. 4.6. Оптические функции бустерного синхротрона на длине одного суперпериода. Дипольный магнит – синий прямоугольник, квадрупольный магнит – красный прямоугольник, секступольный магнит – черный вертикальный штрих, горизонтальная бета-функция – красная линия; вертикальная бета-функция – синяя линия; горизонтальная дисперсионная функция – зеленая линия.

Бустерный синхротрон имеет периметр, приблизительно равный 110.9 м, и будет располагаться в одном тоннеле с основным накопителем. Основные параметры бустерного синхротрона представлены в таблице 4.4.

Оптимизация магнито-оптической структуры является задачей поиска оптимальных значений самосогласованных величин – натурального эмиттанса, динамической апертуры и рабочей точки на частотной диаграмме устойчивости. Структура бустера обеспечивает натуральный эмиттанс 43.4 нм·рад на энергии 2.5 ГэВ. Рабочая точка имеет значения $Q_x = 7.178$, $Q_y = 4.367$ и, что важно, располагается вдали от машинных резонансов $m\nu_x \pm n\nu_y = 12p$, где m, n, p – целые числа. Динамическая апертура идеальной (без ошибок) структуры бустерного синхротрона лежит в интервалах: для горизонтального направления $[-93, 129]$ мм, для вертикального направления $[-105, 105]$ мм, – и превышает внутренние размеры вакуумной камеры 20×50 мм (в×ш).

Ошибки выставки магнитных элементов, неоднородность магнитных полей приводят к искажениям магнито-оптической структуры, к смещению равновесной орбиты и рабочей точки, к уменьшению динамической апертуры. При численном моделировании закладывались следующие возможные ошибки: смещение элементов в трёх плоскостях – 0.2 мм, поворот элементов относительно трёх осей – 0.1 мрад, ошибка дипольного поля – 10^{-4} , от-

носительная неоднородность дипольного поля – $2 \cdot 10^{-4}$, ошибка градиента квадрупольного поля – $5 \cdot 10^{-4}$. Расчет структуры бустерного синхротрона с учётом и без ошибок был выполнен в программе MAD-X. При моделировании закладывалось 1000 наборов случайных ошибок, имеющих Гауссово распределение, ограниченное интервалом $\pm 2\sigma$.

Таблица 4.4. Параметры бустерного синхротрона

Диапазон энергий	200 МэВ ÷ 2.5 ГэВ	
Количество суперпериодов	12	
Периметр	110.873 м	
Частота рабочего цикла	1 Гц	
Ток пучка	10 ÷ 15 мА	
Частота обращения	2.704 МГц	
Частота ВЧ-системы	181.1 МГц	
Бетатронные частоты: гор. Q_x /верт. Q_y	7.178/4.367	
Макс./мин. структурные функции		
горизонтальная бета-функция $\beta_{y \max}/\beta_{y \min}$, м	8.472/1.323 м	
вертикальная бета-функция $\beta_{y \max}/\beta_{y \min}$	10.156/1.528 м	
дисперсия $\eta_{y \max}/\eta_{y \min}$	0.715/0.147 м	
Натуральный хроматизм: гор. ξ_x /верт. ξ_y	-9.0186/-8.5569	
Коэф. уплотнения орбит, α	0.00997	
Горизонтальный эмиттанс ε_x при 2.5 ГэВ	43.4 нм·рад	
Разброс по энергии σ_E/E при 2.5 ГэВ	0.084 %	
Потери энергии за оборот U_0 при 2.5 ГэВ	538.6 кэВ	
Времена затухания:	200 МэВ	2.5 ГэВ
горизонтальных колебаний τ_x , с	6.9 с	3.53 мс
вертикальных колебаний τ_y , с	6.7 с	3.43 мс
продольных колебаний τ_s , с	3.3 с	1.69 мс

Согласно результатам моделирования средние значения отклонения равновесной орбиты для 1000 наборов произвольно заданных ошибок составили: в горизонтальном направлении – 7.5 мм, в вертикальном направлении – 6.9 мм. Наибольший вклад в искажение орбиты вносят ошибки выставки квадрупольных магнитов в горизонтальном и вертикальном направлениях.

Согласно расчетам смещение рабочей точки происходит в сторону разностных резонансов 3-го и 4-го порядков, которые не представляют опасности при работе бустерного синхротрона. Наибольший вклад в разброс частот вносят ошибки выставки квадрупольных и секступольных магнитов в горизонтальном направлении, ошибки градиента квадрупольного поля и наличие градиента дипольного поля. При этом динамическая апертура с учетом ошибок остается больше геометрической. Расположение рабочей точки на частотной диаграмме устойчивости изображено на рисунке 4.7: рабочая точка идеальной структуры отмечена крестом; смещённая рабочая точка отмечена красными точками для каждого из 1000 наборов произвольно заданных ошибок.

Динамическая апертура представлена на рисунке 4.8: апертура для идеальной структуры отмечена красной линией; апертура для структуры с ошибками отмечена синими пунктирными линиями для 5 наборов произвольно заданных ошибок; чёрной линией отмечено сечение вакуумной камеры.

Корректировать орбиту в бустерном синхротроне предполагается с помощью 24 корректирующих магнитов и 24 катушек коррекции поля дипольных магнитов. Коррекция

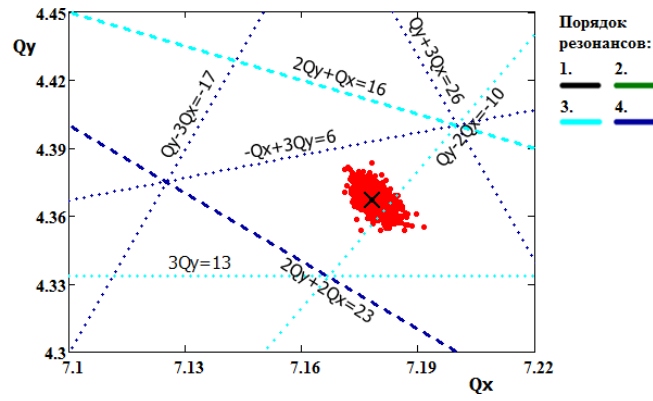


Рис. 4.7. Рабочая точка на диаграмме устойчивости бустерного синхротрона

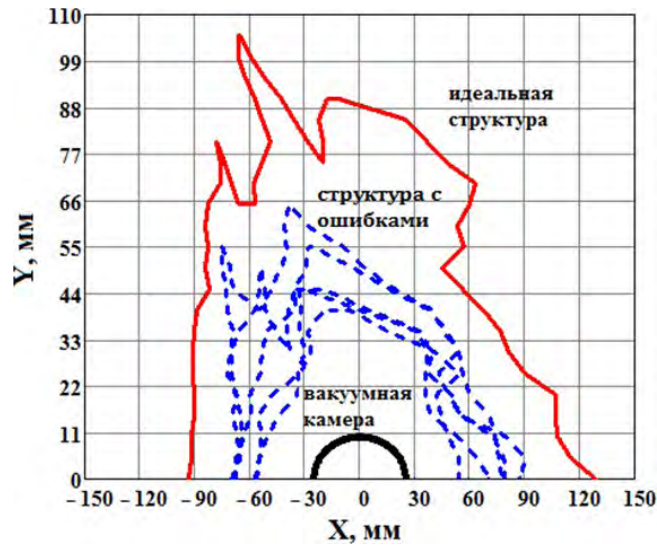


Рис. 4.8. Динамическая апертура бустерного синхротрона

орбиты проводилась в программе MAD-X с помощью алгоритма SVD (Singular Value Decomposition). Среднее значение максимальной силы корректирующих магнитов для горизонтального направления составило 0.3 мрад, для вертикального направления – 0.48 мрад. Максимальная сила корректирующих катушек для горизонтального направления составляет 0.19 мрад. После коррекции остаточные отклонения орбиты составили: среднее значение по горизонтали – 0.12 мм, среднее значение по вертикали – 0.14 мм.

Магнитные элементы БС

Дипольный магнит бустерного синхротрона состоит из верхней и нижней половин. Общий вид и поперечное сечение дипольного магнита представлены на рисунке 4.9. Магнит имеет две основных катушки возбуждения для создания ведущего магнитного поля и две дополнительных катушки для коррекции поля. Длина магнита равна 1679 мм при радиусе изгиба 6415 мм. При этом эффективная длина магнита составляет 1679.363 мм. Торцы магнита параллельны друг другу. Межполюсный зазор равен 24 мм. Максимальное поле в межполюсном зазоре составляет 1.3 Т. Магнит обеспечивает угол поворота траектории частиц в 15 град. Геометрия полюса магнита, подобранная при двумерном и трехмерном моделировании, обеспечивает в области хорошего поля $20 \times 40 \text{ мм}^2$ (в×ш) интегральную неоднородность дипольного поля в пределах требуемого значения $\pm 2 \cdot 10^{-4}$ в диапазоне энергий 200 МэВ до 2.5 ГэВ (рисунок 4.10).

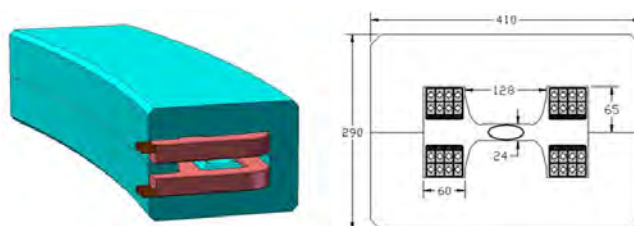


Рис. 4.9. Общий вид и поперечное сечение дипольного магнита

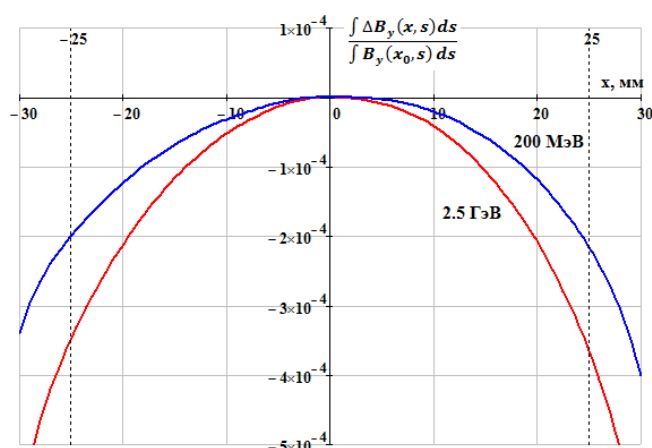


Рис. 4.10. Интегральная неоднородность дипольного магнитного поля

Квадрупольные магниты сгруппированы в три семейства: два семейства фокусирующих линз и одно семейство дефокусирующих линз. Соответствующие максимальные градиенты квадрупольного поля при энергии 2.5 ГэВ составляют 21.12 Тл/м, 20.89 Тл/м и -23.55 Тл/м. Общий вид и поперечное сечение магнита представлены на рисунке 4.11. Квадрупольный магнит имеет разъемное ярмо, состоящее из четырёх одинаковых частей. Магнит имеет четыре основных катушки возбуждения для создания градиентного магнитного поля и четыре дополнительных катушки для коррекции градиента поля. Подобранная геометрия полюса магнита обеспечивает в области хорошего поля $20 \times 40 \text{ мм}^2$ интегральную неоднородность квадрупольного поля в пределах требуемого значения $\pm 5 \cdot 10^{-4}$ в диапазоне энергий 200 МэВ до 2.5 ГэВ (рисунок 4.12). Эффективная длина магнита на энергии инжекции 200 МэВ составляет 321.679 мм, на энергии 2.5 ГэВ – 320.053 мм при длине магнита по железу 300 мм.

Секступольные магниты бустерного синхротрона поделены на два семейства: линзы для коррекции горизонтального хроматизма и линзы для коррекции вертикального

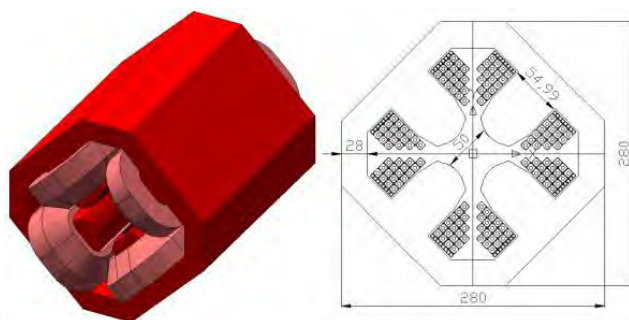


Рис. 4.11. Общий вид и поперечное сечение квадрупольного магнита

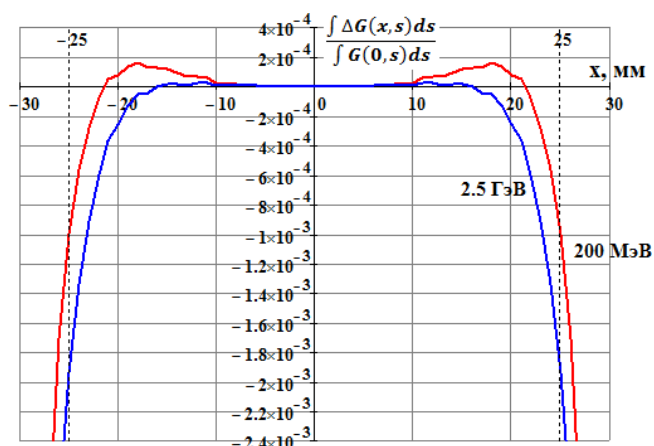


Рис. 4.12. Интегральная неоднородность градиента квадрупольного поля магнита

хроматизма. Максимальные градиенты секступольного поля при энергии 2.5 ГэВ равны 90 Тл/м² и -215 Тл/м² соответственно. Общий вид и поперечное сечение магнита представлены на рисунке 4.13. Секступольный магнит имеет разъемное ярмо, состоящее из шести одинаковых частей, и шесть основных катушек возбуждения. Подобранный геометрия полюса магнита обеспечивает в области хорошего поля 20×40 мм² интегральную неоднородность секступольного поля в пределах требуемого значения $\pm 1 \cdot 10^{-3}$ в диапазоне энергий 200 МэВ до 2.5 ГэВ (рисунок 4.14). Эффективная длина магнита и длина по железу равны 100 мм.

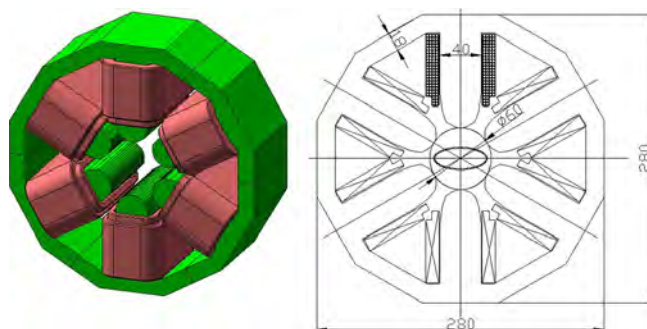


Рис. 4.13. Общий вид и поперечное сечение секступольного магнита

Корректирующий магнит совмещает в себе функции горизонтального и вертикального корректора и представляет собой рамочный дипольный магнит. Общий вид и поперечное сечение магнита представлены на рисунке 4.15. Длина магнита по железу составляет 100 мм. Корректор содержит две катушки для коррекции горизонтальной орбиты и две катушки для коррекции вертикальной орбиты. Максимальный угол поворота в корректоре составляет 0.75 мрад.

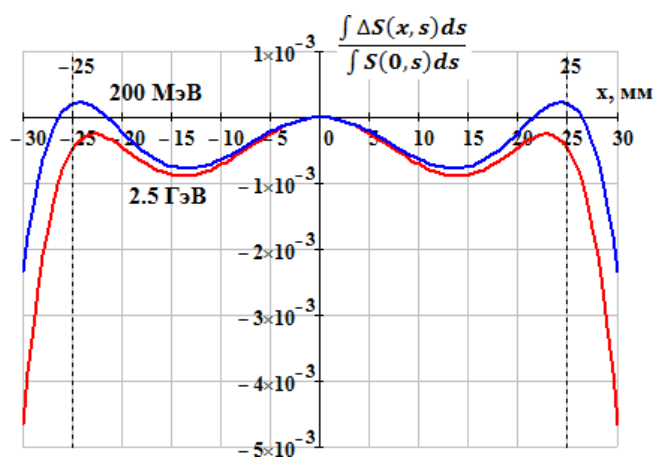


Рис. 4.14. Интегральная неоднородность секступольного поля магнита

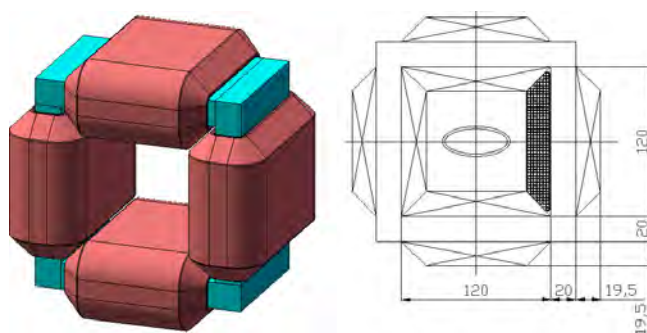


Рис. 4.15. Общий вид и поперечное сечение корректирующего магнита

ВЧ-система бустерного синхротрона

Инжекция электронов из линейного ускорителя в бустерный синхротрон будет осуществляться на энергии электронов 200 МэВ. ВЧ-система бустерного синхротрона обеспечит захват в режим ускорения электронов с током не ниже 15 мА и энергетическим разбросом $\pm 1.5\%$. Для установления разумного времени жизни пучка на энергии 2.5 ГэВ ВЧ БС обеспечит энергетический аксептанс в пределах 0.5% и компенсирует потери энергии электронами на синхротронное излучение равные 540 МэВ/оборот.

ВЧ-система бустерного синхротрона полагается аналогичной ныне действующей на основном накопителе Курчатовского источника синхротронного излучения. Она строится на одном ВЧ-генераторе и одном ускоряющем резонаторе. Рабочая частота ВЧ-системы бустера принимается равной частоте ВЧ-системы основного накопителя – 181 МГц. При этом частота равна 67 гармонике частоты обращения в бустере (2.704 МГц). Такой выбор является оптимальным с точки зрения наилучшей синхронизации обоих ускорителей, перепуска электронных сгустков в заранее заданные сепаратрисы без потерь и раскачки когерентных колебаний.

Долговременная рабочая выходная мощность ВЧ генератора составляет 200 кВт в непрерывном режиме на частоте в диапазоне от 180 до 182 МГц. При этом, с учётом активных потерь в стенках резонатора, мощность, планируемая на компенсацию потерь на СИ, составляет около 100 кВт. Передача мощности от выходного каскада к резонатору осуществляется по коаксиальному волноводу (фидеру) на 75 Ом .

4.5. Параметры источников на базе вставных устройств до и после модернизации

В настоящее время на синхротронном источнике установлено три специализированных устройства-излучателя — сверхпроводящих вигглера.

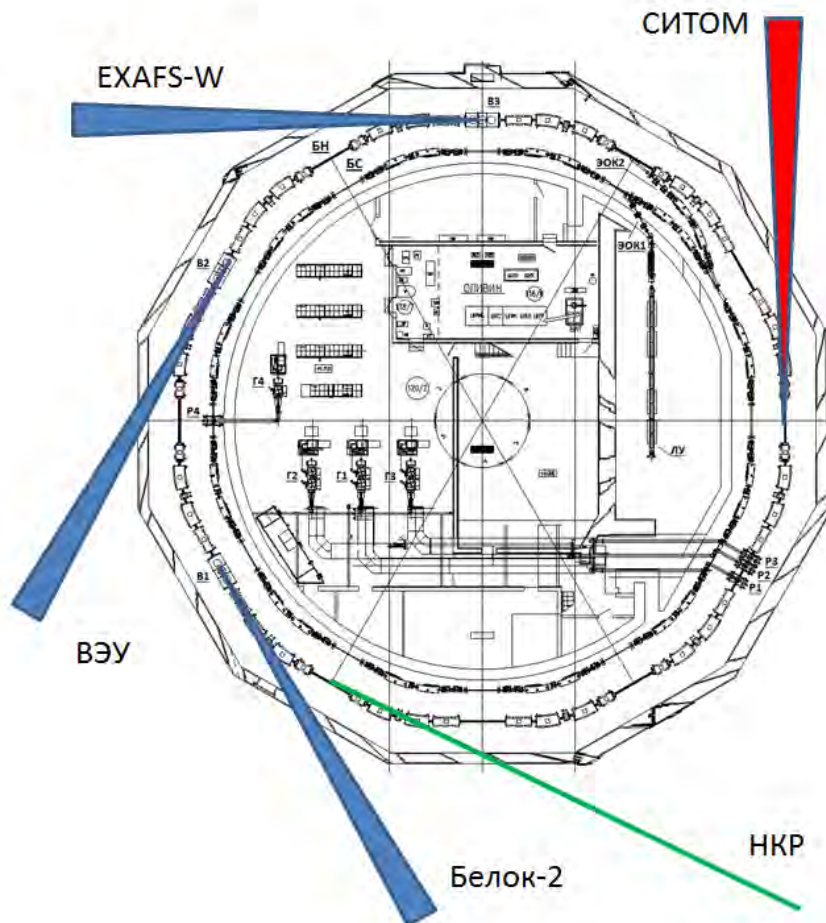


Рис. 4.16. Схема расположения вставных устройств КИСИ. Синие треугольники – установленные сверхпроводящие вигглеры, красный треугольник – запланированный трёхполюсный вигглер, зелёная прямая – запланированный короткопериодный ондулятор

Таблица 4.5. Параметры вставных устройств, $I_e=100$ мА.

Параметры	Вигглер №1	Вигглеры №2, №3	Шифтер	Ондулятор
Станция	EXAFS-W	Белок-2, ВЭУ	СИТОМ	НКР
Рабочее магнитное поле	4.5 Тл	3 Тл	5.1 Тл	1.0 Тл
Период	164 мм	48 мм	—	14.4 мм
Число основных полюсов	19	50	1	200
Излучаемая мощность	8 кВт	5 кВт	1.5 кВт	0.8 кВт
Расходимость по горизонтали	± 10 мрад	± 3 мрад	± 15 мрад	± 0.15 мрад
Размер источника после модернизации $V \times H$	3.2×0.06 мм	0.5×0.05 мм	0.15×0.06 мм	0.15×0.06 мм
Критическая энергия фотонов	18.7 кэВ	12.5 кэВ	21.7 кэВ	—

Параметры нового ускорителя – малый эмиттанс и значения бета-функций – позволяют установить высокоэффективные излучающие устройства – ондуляторы. Для получения

рентгеновского излучения необходимо использовать ондуляторы с периодом менее 18 мм. Примерами устройств могут служить сверхпроводящий ондулятор с периодом 15.6 мм, разрабатываемый в настоящее время для проекта «СКИФ», и ондулятор на постоянных магнитах с периодом 14.4 мм, аналогичный установленному на синхротроне ESRF. На рисунке 4.17 приведены кривые спектральной яркости этих ондуляторов при их использовании на модернизированном синхротроне «КИСИ-Курчатов». Для сравнения приведён график яркости сверхпроводящего ондулятора на синхротроне «СКИФ». Как можно видеть, яркость ондулятора «КИСИ-Курчатов» будет всего на порядок уступать яркости синхротрона «СКИФ» в диапазоне до 40 кэВ.

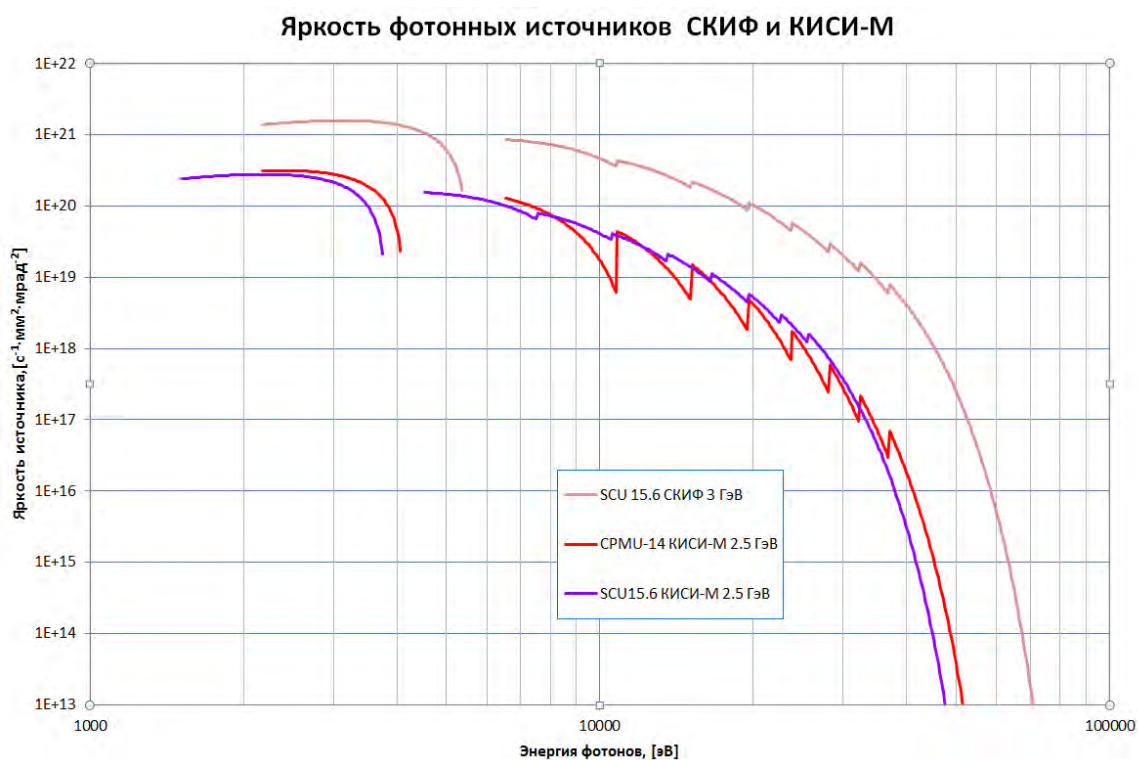


Рис. 4.17. Сравнение настроечных кривых короткопериодных ондуляторов синхротронов «СКИФ» и «КИСИ-Курчатов» после модернизации. Коричневая кривая – сверхпроводящий ондулятор с периодом 15.6 мм на синхротроне «СКИФ», фиолетовая кривая – тот же ондулятор 15.6 мм на синхротроне «КИСИ-Курчатов», красная кривая – вакуумный ондулятор на постоянных магнитах с периодом 14.4 мм

Глава 5

Концепция развития экспериментальных станций модернизированного синхротрона «КИСИ-Курчатов»

В ходе выполнения работ по модернизации источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» кроме модернизации ускорительного комплекса, запланированы развитие и модернизация парка экспериментальных станций.

Был выработан целевой перечень станций синхротрона, определены назначение проектируемых станций, круг потребителей, необходимые экспериментальные методики, а также базовые параметры источников излучения.

5.1. Перечень экспериментальных станций синхротрона «КИСИ-Курчатов» после модернизации

В перечень станций вошли:

- | | |
|-------------------------------|-------------------------------|
| 1. Станция Ленгмюр К.1.2 | 11. Станция Метрологии К.3.6. |
| 2. Станция СТМ К.1.3 | 12. Станция НКР К.4.1. |
| 3. Станция EXAFS-W К.1.4 | 13. Станция МУРР К.4.2. |
| 4. Станция РТ-МТ К.1.6. | 14. Станция МЕДИАНА К.4.3. |
| 5. Станция Микрофокус К.2.2. | 15. Станция РКФМ К.4.5. |
| 6. Станция Фаза К.2.3. | 16. Станция ОНПЭ К.4.6. |
| 7. Станция ВЭУ К.2.4. | 17. Станция СИТОМ К.6.1. |
| 8. Станция РСА-Белок К.2.6. | 18. Станция ЛИГА К.6.3. |
| 9. Станция Белок-2 (W) К.3.4. | 19. Станция НаноФЭС К.6.5. |
| 10. Станция БиоМУР К.3.5. | 20. Станция ПРО К.6.6. |

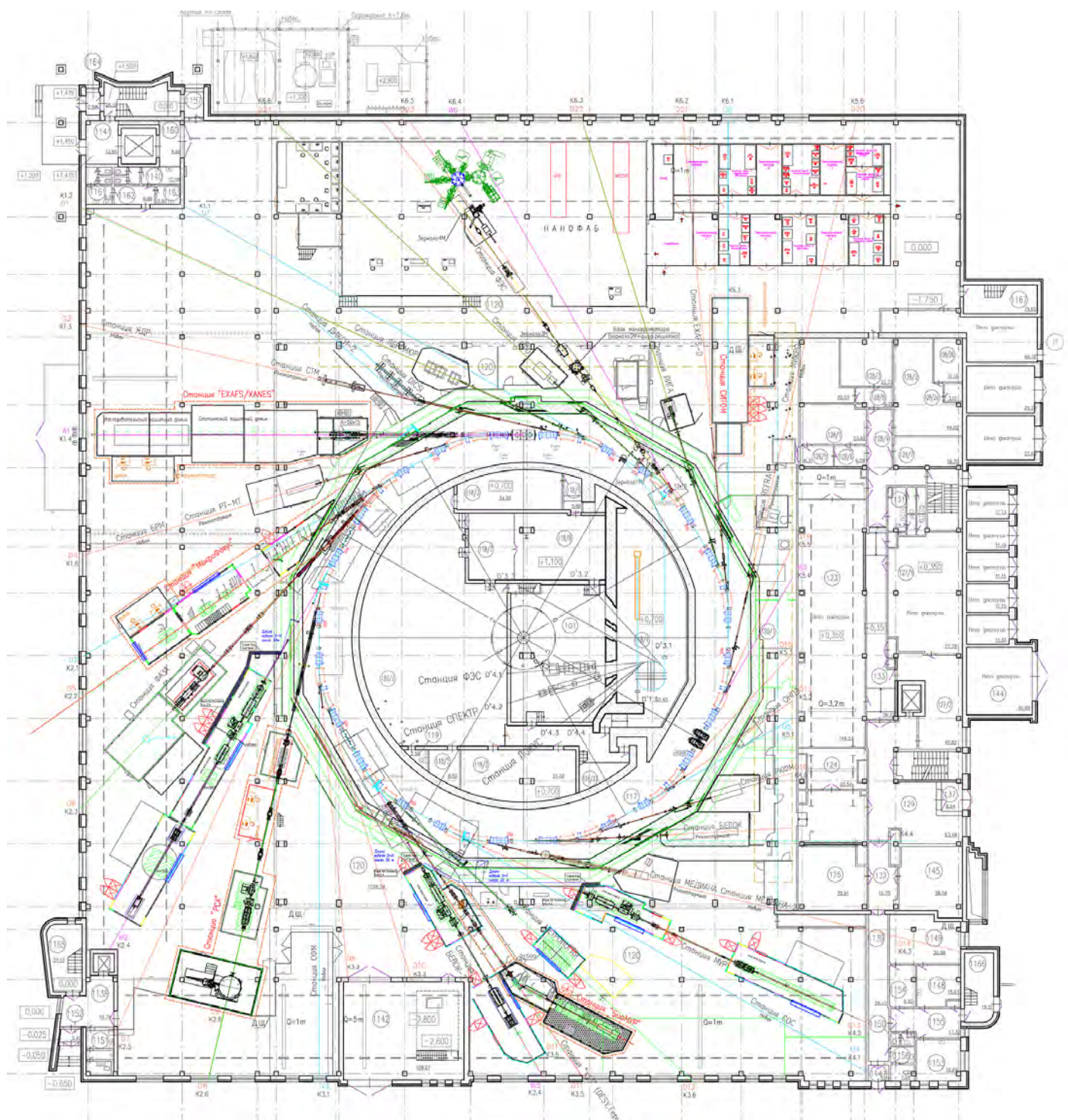


Рис. 5.1. План экспериментального зала «КИСИ-Курчатов» по состоянию на 2021 год с учетом вводимых в эксплуатацию станций до 2024 года

5.2. Вводимые в строй станции

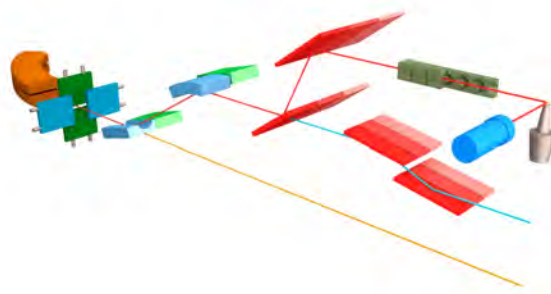
5.2.1. Станция МИКРОФОКУС

Назначение: анализ микроэлементного состава и структуры с высокой локальностью по поверхности образца с использованием белого и монохроматического синхротронного излучения.

Описание станции: станция позволяет проводить съёмку двумерных карт распределения элементов в следовых количествах с порядковыми номерами $20 < Z < 82$ (с возбуждением К-оболочки). Объектами исследования являются произведения искусства, объекты культурного наследия, твердотельные образцы минералогического, геологического и археологического происхождения. На станции может проводиться аттестация различных элементов и схем фокусирующей рентгеновской оптики. Ожидается, что в ходе модернизации станция сможет достичь мирового уровня Nanoprobe-станций синхротронов третьего поколения, и фундаментальные ограничения её характеристик будут исходить лишь от параметров источника, улучшение которых требует постройки синхротронного комплекса 4 поколения, а также ограничений по длине канала, диктуемых размером здания.



(а)



(б)

Рис. 5.2. Изображение (а) и схема (б) станции МИКРОФОКУС

Экспериментальные методы:

- Картирование микроэлементного состава по поверхности образца.
- Картирование EXAFS/XANES образцов с различными режимами детектирования (пропускание, флуоресценция, фототок).
- Micro imaging (в том числе микротомография) в геометрии пропускания, отражения и флуоресценции, рефракционный контраст.
- Микродифракция с высоким пространственным разрешением по поверхности образца с применением «обратного» рассеяния (на отдельных зернах).
- Остаточные напряжения (обратное рассеяние).
- Online нагрузочные эксперименты (обратное рассеяние).

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): на станции проводятся исследования в интересах атомной промышленности (коррозия циркония, томография частиц топлива), микроэлектроники (томография микросхем с субмикронным разрешением, остаточные напряжения чипов), биомедицины (слабо контрастированные образцы (например, мозг)), а также в области гуманитарных наук (изучение состава артефактов картин, скульптур, керамики, петроглифов).

5.2.2. Станция ПРО (прецизионной рентгеновской оптики)

Назначение: модернизируемая станция прецизионной рентгеновской оптики и временного разрешения ориентирована на проведение исследований с высоким временным и пространственным разрешением методами спектроскопии поглощения и рентгеновской дифрактометрии.

Описание станции: станция основана на применении уникальных рентгенооптических элементов – адаптивных рентгеноакустических монохроматоров и анализаторов. С их помощью осуществляется быстрое, прецизионное сканирование условий эксперимента и достигается временное разрешение вплоть до 100 мкс в режиме «рентгеновского кино». С использованием такого подхода могут быть исследованы химические реакции, механизмы дефектообразования в твёрдых телах, изменение функциональных свойств материалов в условиях внешних воздействий и многие другие процессы. Станция ПРО ориентирована на исследования широкого класса объектов от твердых тел, моно- и поликристаллов до жидкостей.

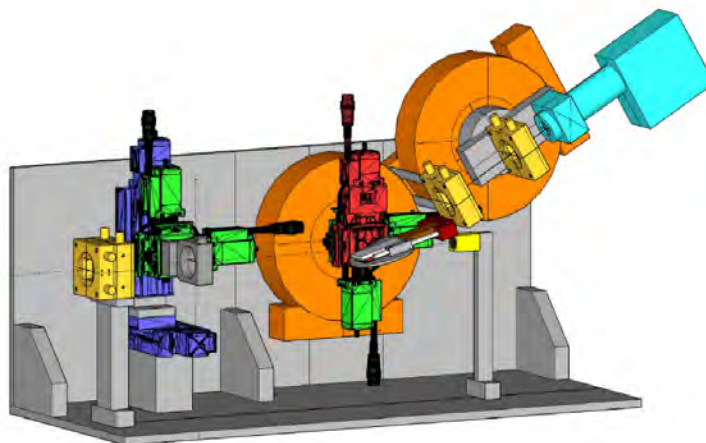


Рис. 5.3. Схема станции ПРО

Экспериментальные методы:

- Двухкристальная дифрактометрия с разрешением по времени.
- Многоволновая дифракция.
- Резонансная дифракция.
- Рентгеновская спектроскопия поглощения с временным разрешением.

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): исследование процессов, протекающих в конденсированных средах, в том числе биологической природы, не только на всех уровнях пространственного разрешения (от миллиметрового до ангстремного), но и в широком диапазоне временных масштабов является одной из наиболее приоритетных задач современного материаловедения. Экспериментальные возможности этой станции станут залогом получения уникальной информации о превращениях, происходящих на атомном уровне в исследуемом образце, будь то кристаллический материал или биологический объект, что позволит лучше понять физическую природу этих процессов и, как следствие, научиться ими управлять.

5.2.3. Станция EXAFS-W

Назначение: исследование электронной и локальной атомной структуры, а также магнитных характеристик широкого круга функциональных материалов на базе рентгеноабсорбционной спектроскопии EXAFS/XANES.

Описание станции: используемый на станции диапазон энергий фотонов составит 5-60 кэВ. Станция будет размещена на канале вывода СИ из сверхпроводящего вивглера.

На станции будут изучаться кристаллические и аморфные порошки, катализаторы, стёкла, растворы, ультраразбавленные и тонкопленочные образцы. Кроме того, востребованы будут спектральные исследования таких элементов, как Cd, In, Sn, Sb, Te, а также исследования объектов с макроскопической намагниченностью.

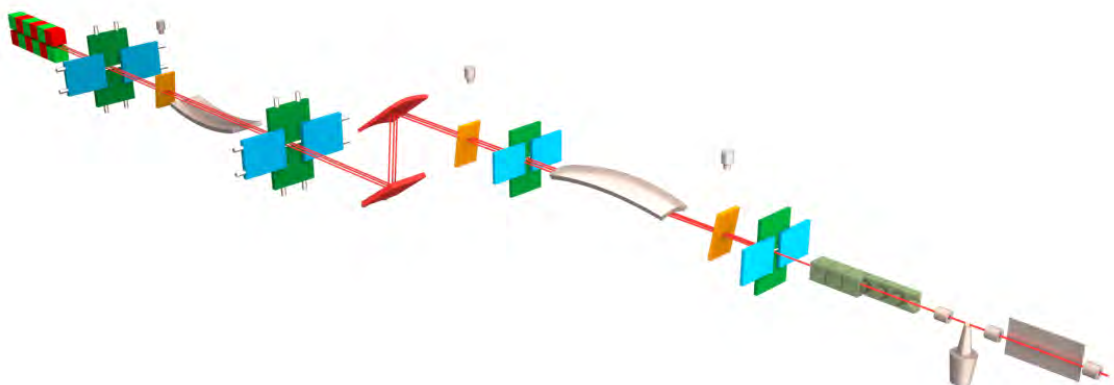


Рис. 5.4. Схема станции EXAFS-W

Экспериментальные методы:

- Спектроскопия EXAFS/XANES в режиме пропускания для образцов, концентрированных по исследуемому элементу.
- Спектроскопия EXAFS/XANES в режиме регистрации квантового выхода флуоресценции для образцов, разбавленных по исследуемому элементу, а также тонких плёнок (5-1000 нм).
- Поверхностно-чувствительный SEXAFS в режиме регистрации фототока для исследования приповерхностных слоёв и ультратонких плёнок (0.5-5 нм).
- Рентгеновский магнитный круговой дихроизм (XMCD) в жёсткой рентгеновской области.
- Рентгеновский магнитный линейный дихроизм и спин-поляризованный EXAFS.

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): научные задачи станции широко представлены в областях биологии, химии, геологии и наук об окружающей среде (экология, токсикология и др.). Исследования могут быть полезны при разработке лекарств, катализаторов, химических средств и т.д. Для задач экологии очень важна чувствительность к низким концентрациям, т.к. многие загрязняющие элементы находятся в низких концентрациях (до единиц ppm). Определение форм вхождения критически важных для промышленности химических элементов позволит повысить эффективность извлечения полезных ископаемых. Результаты исследований потенциально интересны для

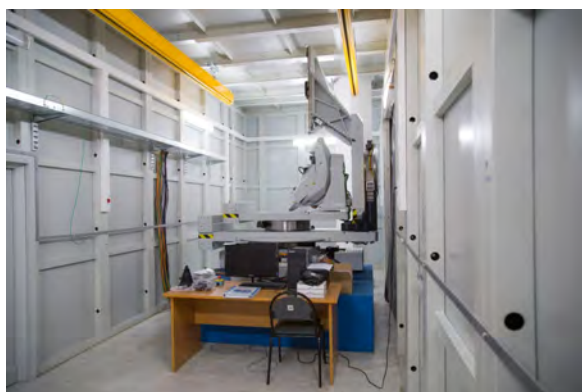
промышленности: химической, фармацевтики, медицины, добычи полезных ресурсов, металлургии, микроэлектроники и др. На станции EXAFS-W будут проводиться исследования по следующим практически значимым направлениям:

- *In situ*-исследование процессов протекания химических реакций, область, имеющая значение, в том числе, для проблем катализа и переработки углеводородов.
- Исследование примесей редких элементов в матрицах природных минералов, определение механизмов взаимосвязанного нахождения примесей.
- Определение зарядового состояния и форм нахождения химических элементов (от переходных 3d-металлов до актинидов), загрязняющих окружающую среду.

5.2.4. Станция ВЭУ (Вещество в экстремальных условиях)

Назначение: создаваемая станция ВЭУ предназначена для рентгеноструктурных исследований вещества в широком диапазоне статических давлений (до 3 Мбар), температур (4 – 3000 К), с использованием алмазных наковален, камер типа тороид, криостатов, резистивных нагревателей и лазерного нагрева.

Описание станции: проведение экспериментов на станции ВЭУ возможно с использованием как «белого», так и монохроматического пучка. Синхротронная станция ВЭУ будет размещена на канале 2.4 вывода синхротронного излучения (СИ) из сверхпроводящего 69-полюсного вигглера с полем 3 Тл. На станции будут изучаться порошки и монокристаллы, вещества при высоких статических давлениях в сочетании с низкими и высокими температурами, лазерно-индуцированные процессы.



(а)



(б)

Рис. 5.5. Изображение (а) и схема (б) станции ВЭУ

Экспериментальные методы:

- Энергодисперсионная рентгеновская дифракция на порошках.
- Рентгеновская лауэграфия на монокристаллах в сочетании со спектральным анализом дифрагированного излучения.
- Угловая рентгеновская дифракция на порошках и монокристаллах.
- Рамановская спектроскопия in situ.
- Комбинация рентгеновских и оптических измерений.

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): эксперименты, проводимые на станции ВЭУ, будут иметь практическую значимость для разработки новых материалов, предназначенных для эксплуатации в экстремальных условиях (космоса, Арктики и Антарктики). Кроме того, с появлением станции ВЭУ в России откроется возможность для изучения веществ в условиях экстремальных нагрузок, что необходимо при изучении материалов с уникальными свойствами, возникающими при высоких давлениях и отличающихся от комнатной температур (например, сверхпроводимость).

5.2.5. Станция МУР (малоуглового рассеяния)

Назначение: создаваемая станция МУР предназначена для проведения структурных исследований слабоупорядоченных или неупорядоченных объектов методами малоуглового рассеяния.

Описание станции: предлагаемая схема установки позволяет реализовать все используемые в мире методы малоуглового рассеяния. Предлагается также использование более широкого набора специальных ячеек для получения нестандартных условий на образце. Это придает установке универсальность, что позволяет решать с её помощью многочисленные задачи и обеспечивает активный приток сторонних и внутренних пользователей. Малоугловое рентгеновское рассеяние позволяет определять структурные и размерные характеристики в системах, у которых отсутствует упорядоченная структура, исследование которых другими методами затруднено или невозможно.

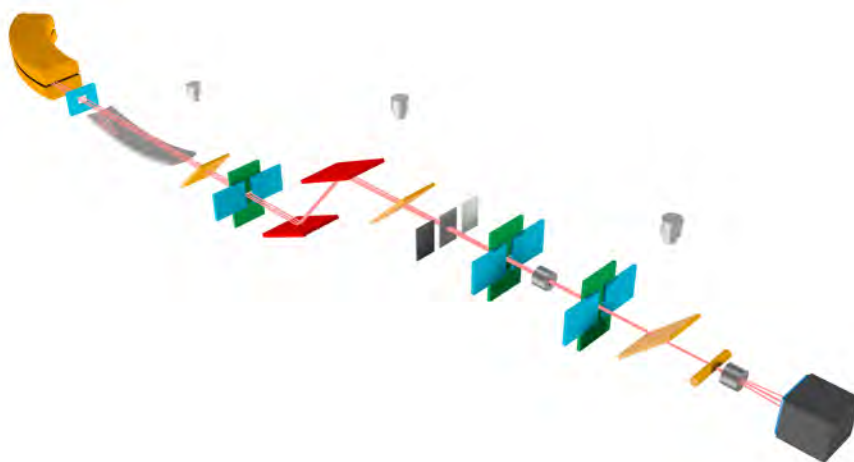


Рис. 5.6. Схема станции малоуглового рассеяния на канале 4.3

Экспериментальные методы:

- Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей (SAXS).
- Широкоугловое рассеяние рентгеновских лучей (WAXS).
- Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей под скользящим углом падения (GISAXS).
- Аномальное малоугловое рассеяние рентгеновских лучей (ASAXS).
- Ультра-малоугловое рентгеновское рассеяние (USAXS).

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): метод малоуглового рассеяния активно используется как один из основных структурных методов для описания объектов в материаловедении (нанесенные катализаторы, квантовые точки, наночастицы в матрицах, композиционные материалы), металлургии (распад твёрдых растворов, кристаллизация металлических стёкол), при изучении формы белковых молекул в нативном состоянии (например, в растворах) и в медицинских применениях наночастиц (феррожидкости и т.п.), при структурных исследованиях полимеров, эмульсий и процессов самоорганизации в растворах, а также при изучении нано- и мезо-структуры биосовместимых материалов, объектов фотоники, метаматериалов.

5.2.6. Станция БЕЛОК-2(W)

Назначение: проведение высокоскоростной и высокоточной рентгеновской дифрактометрии макромолекулярных монокристаллов (белки, нуклеиновые кислоты и вирусы) в широком диапазоне энергий излучения.

Описание станции: станция обеспечивает измерение слабых аномальных сигналов для решения фазовой проблемы и идентификации сорта атомов в структуре, получения дифракционных данных от кристаллов с очень большими периодами решётки, съёмку с атомным разрешением. Синхротронная станция БЕЛОК-2(W) будет использовать излучение из сверхпроводящего 69-полюсного вигглера с полем 3 Тл.

Рентгеновская оптика станции обеспечивает стабильный во времени и пространстве монохроматичный пучок СИ с энергетическим разрешением не хуже 0.02% на энергии 12 кэВ (в случае использования Si(111) монохроматора) и регулируемые линейными размерами и угловой расходимостью пучка на образце для оптимизации условий измерений в соответствии с параметрами исследуемого объекта.

Возможность получения станции, работающей с кристаллами макромолекул в Курчатовском институте на уровне лучших европейских аналогов, открывает огромные возможности по изучению структурных особенностей макромолекул белков, вирусов, а также комплексов белков с низкомолекулярными соединениями. По сравнению с источниками четвёртого поколения, которые будут загружены экспериментами научных институтов со всех уголков страны, источник третьего поколения в Курчатовском институте сможет выделять большую часть пучкового времени для работы на внутренних пользователей. А наличие Белковой фабрики НБИКС-центра рядом с действующей синхротронной станцией такого уровня поставит на поток белковые эксперименты, проводимые на Курчатовском источнике синхротронного излучения, сделав из него сильнейший в стране центр по структурной биологии.

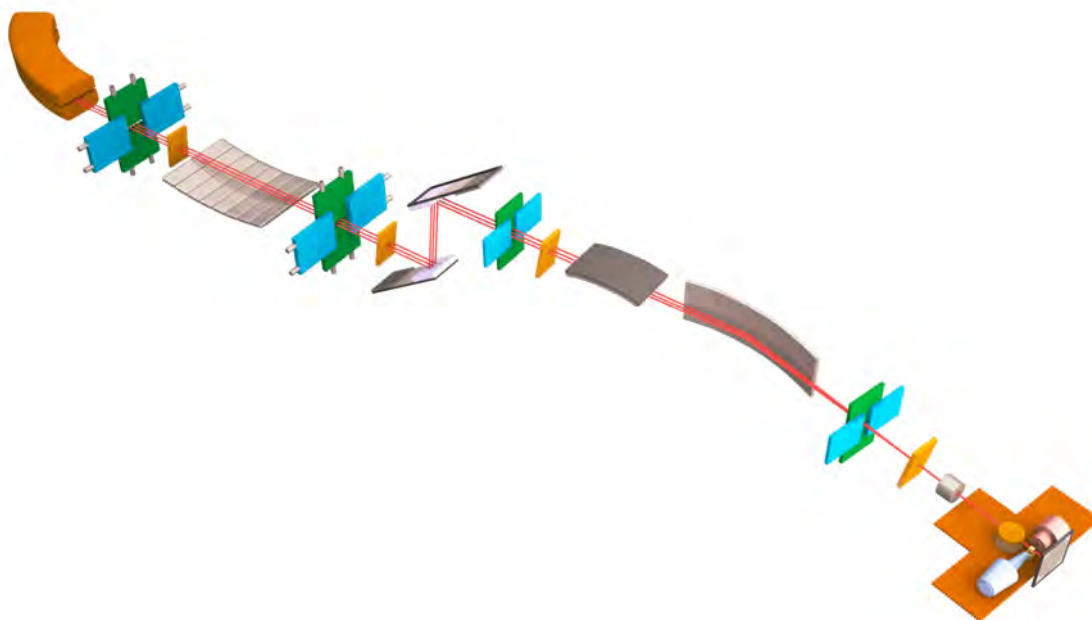


Рис. 5.7. Схема станции БЕЛОК-2(W)

Экспериментальные методы:

метод рентгеновской кристаллографии используется для определения атомной и молекулярной структуры белкового кристалла. Путём измерения углов и интенсивности дифрагированных пучков воспроизводится трёхмерная структура кристалла и плотность электронов, химические связи и другая информация.

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): магистральным вектором работы станции станет исследование атомной структуры биоорганических объектов с целью установления молекулярных механизмов функционирования различных биоорганических систем; исследование соединений с биологической активностью, перспективных для медицины, фармакологии.

5.3. Проектируемые станции



5.3.1. Станция Метрология

Назначение: станция предназначена для обеспечения промышленных прорывных технологий в области инновационного материаловедения, полупроводниковой электроники и энергетики.

Описание станции: станция создаётся с учётом доработки необходимой инфраструктуры и развития приборно-инструментальной базы для измерения и калибровки спектральной чувствительности приёмников (детекторов) ультрафиолетового и рентгеновского излучения, обеспечения работы государственного первичного спектрометрического эталона (учитывая введенные в 2019 новые методы определения единиц международной системы СИ), а также аттестации структурных параметров тонкопленочных покрытий и наноструктурированных материалов, метрологического обеспечения рефлектметрии. Созданная инфраструктура позволит обеспечить международное признание результатов измерений и калибровок, выполняемых на синхротронном источнике, в странах-участниках Метрической конвенции.

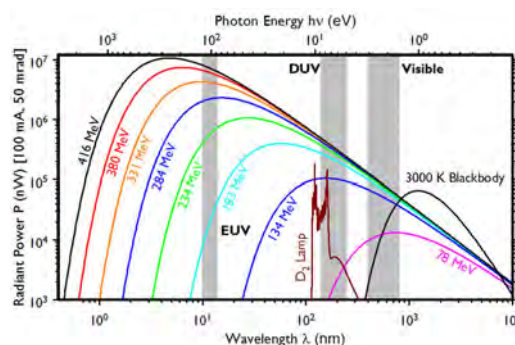


Рис. 5.8. Сравнение спектров эталонных лабораторных и синхротронных источников

Экспериментальные методы:

- Первичная радиометрия и спектрометрическая калибровка приемников излучения.
- ВУФ-рефлектметрия.
- Скаттерометрия.
- Радиометрия.
- Спектроскопия в мягком диапазоне.

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): важнейшая задача станции – обеспечение работы государственного первичного спектрометрического эталона, калибровка эталонных детекторов монохроматическим излучением в широком спектральном диапазоне.

Использование возможностей станции для изучения элементов рентгеновской оптики, работающей в области вакуумного ультрафиолета и мягкого рентгена, позволит создавать новые элементы систем рентгеновской и ВУФ-литографии, что необходимо при разработке технологий создания элементов микроэлектроники, в том числе основанных на новых принципах работы, таких как спинтроника, для дальнейшего роста производительности и миниатюризации электронных устройств, микро- и наноэлектромеханических систем. Исследование поляризационных эффектов будет востребовано для создания новых магнитооптических систем, элементов лазерных и аддитивных технологий. Метрология сверхгладких поверхностей имеет большое значение в оптоэлектронике и точной механике.

5.3.2. Станция СИТОМ

Назначение: трёхмерная визуализация внутренней структуры крупных и сильнопоглощающих объектов.

Описание станции: станция предназначена для исследования широкого спектра материалов, различной природы, преимущественно крупных размеров и состоящих из сильнопоглощающих элементов. Излучателем для станции станет вигглер, что обусловит высокую яркость излучения и возможность получать контраст даже на габаритных образцах. Станция СИТОМ будет применяться в таких областях как науки о жизни, культурное наследие, материаловедение, биомедицинские исследования, биологические системы, науки о Земле и окружающей среде, палеонтология.

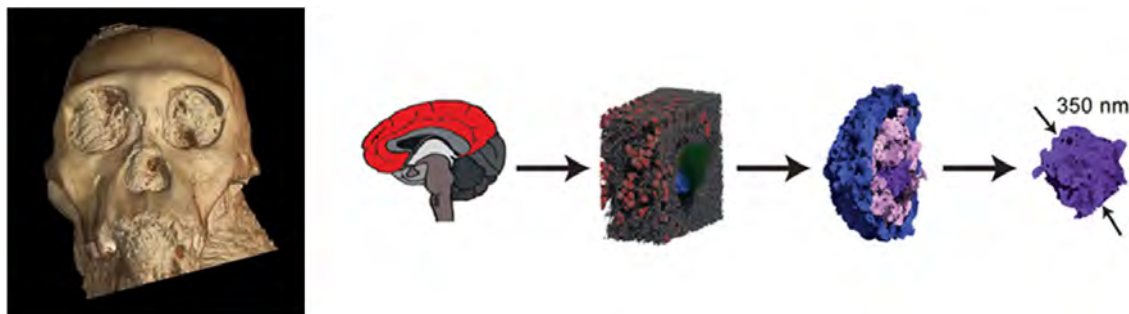


Рис. 5.9. Томография черепа ископаемого человека (слева). Иерархическая визуализация мозга вплоть до нанометрового масштаба (справа)

Экспериментальные методы:

- Радиография.
- Томография с абсорбционным и фазовым контрастом, контрастом края поглощения.
- Иерархическая томография.
- Микротомография.
- Высокоскоростная микротомография.

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): конструкционные особенности экспериментальной станции СИТОМ позволят проводить на ней медико-биологические исследования в областях физиологии, исследовании биологических тканей, новообразований, имплантатов. Кроме того, станут доступны исследования в области перспективных материалов. В исследованиях материалов изучается микроструктура различных типов образцов, начиная с низко поглощающих углерод-углеродных композитов до высоко поглощающих металлических пеноматериалов и бетонных образцов. Особый интерес вызывают исследования поведения материалов *in situ* при изменении внешних условий, например, при механическом нагружении. По сути, эта станция может стать инструментом аттестации аппаратов и систем машиностроения. Также данная станция будет востребована при исследованиях в области культурно-исторического наследия и в области палеонтологии и геологии.

5.3.3. Станция НКР (нанокогерентности)

Назначение: проведение локальных структурных исследований различных материалов, наноразмерных систем, живых и слабо упорядоченных систем, включая стекла, полимеры, дефекты в кристаллах, квантовые точки и нити, деформированные структуры и некоторые неорганические наноструктуры, биологические целые клетки, органеллы, некоторые вирусы и молекулы белков, которые сложно кристаллизовать, с применением методов, основанных на рассеянии когерентного синхротронного излучения.

Описание станции: когерентные методы визуализации внутренней структуры могут применяться для исследования различных видов неоднородностей кристаллической решётки, связанных с оптическими и магнитными свойствами перспективных приборов. Кроме того, когерентные свойства излучения позволят определять атомарную структуру неупорядоченных объектов (белков в нативном состоянии, вирусов) за счёт методов когерентного имиджинга. Использование поляризационных свойств синхротронного пучка открывает перспективы исследования для визуализации магнитных структур и магнитных эффектов за счёт чувствительности к намагниченности, которая основана на эффекте рентгеновского магнитного кругового дихроизма с возможностью достижения высокого разрешения.

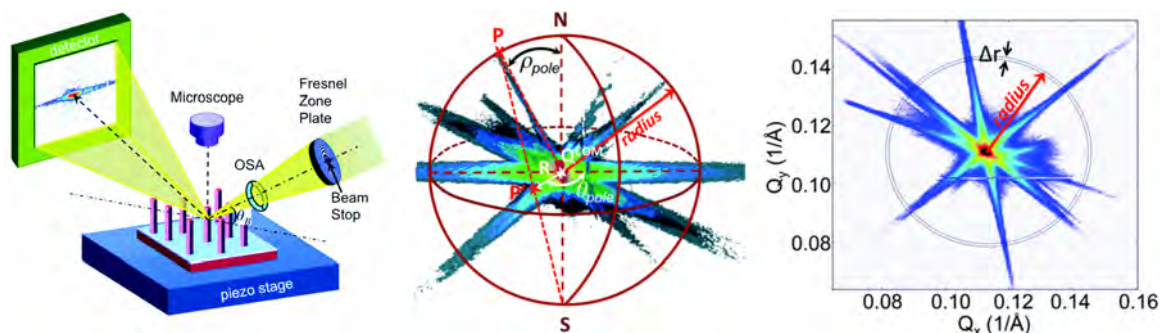


Рис. 5.10. Брэгговская когерентная дифракция от нанопроволок InGaN/GaN

Экспериментальные методы:

- Когерентный дифракционный имиджинг.
- Рентгеновская птомография.
- Нанодифракция.

Практическая значимость (Социально-экономический эффект): применение станции НКР для прикладных исследований обусловлено прежде всего возможностями этой станции исследовать структуру неупорядоченных объектов, к которым относится большинство биологических объектов, имеющих практическое значение для медицины. Дополнительное преимущество станции придаёт возможность изучения на ней магнитных свойств материалов, которая имеется сегодня лишь на считанном количестве экспериментальных станций зарубежных синхротронов. Подобные исследования необходимы при разработке новых систем «магнитной электроники» – спинтроники.

Глава 6

Подготовка проекта синхротрона для источника четвертого поколения СИЛА

В главе представлены работы, выполненные в рамках проекта CREMLIN Plus отделом новых ускорительных технологий ККСНИ совместно с группой сотрудников ESRF.¹ Основная задача проекта — разработка синхротронного источника СИЛА — дифракционно ограниченного накопительного кольца с энергией 6 ГэВ, с целевым горизонтальным эмиттансом 70 нм·рад. Общая компоновка и основные характеристики накопительного кольца подобны структуре ускорителя синхротрона ESRF-EBS, однако увеличенная длина и уменьшенный эмиттанс требуют полного пересмотра структуры кольца. Кроме того, синхротрон СИЛА строится на новой площадке и поэтому не имеет тех ограничений, что синхротрон ESRF-EBS, и его система инжекции может быть спроектирована так, чтобы оптимальным образом удовлетворить требования к инжектору для источника четвёртого поколения. В отчёте представлена структура накопительного кольца, дана оценка достижимых параметров для различных вариантов инжекции.

6.1. Структура накопительного кольца

В качестве стартовой точки для разработки структуры нами была взята структура ESRF-EBS. Перед нами стояла задача снизить натуральный горизонтальный эмиттанс структуры с 130 до 70 пм·рад. Учитывая, что СИЛА будет работать на той же энергии и с близкой структурой одного периода, можно получить требуемый эмиттанс за счёт увеличения числа секций, используя известный закон:

$$\varepsilon \propto \frac{E^2}{N_c^3},$$

где E — энергия пучка электронов, а N_c — число периодов. Масштабируя ускоритель по указанному закону, можно получить, что эмиттанс 70 пм·рад может быть достигнут при $39 > N_c > 40$. Поэтому естественным способом достижения указанной цели является увеличение числа ячеек с 32 до 40, при этом сохраняется хорошо оптимизированная стандартная ячейка ESRF-EBS.

¹S.M.Liuzzo, N.Carmignani, L.Carver, T.Perron, R.Versteegen, S.White

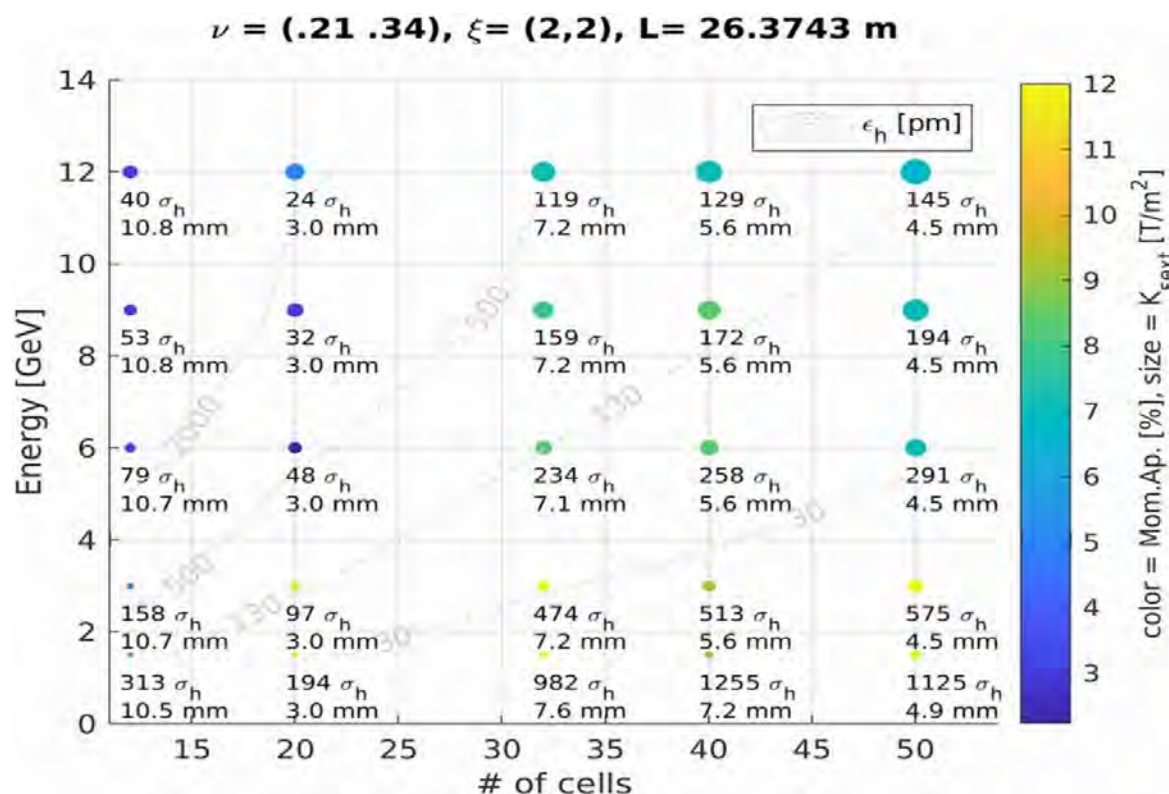


Рис. 6.1. Матрица основных характеристики ускорителя в зависимости от энергии пучка и количества идентичных секций (без инжекционных). Даны размеры динамической апертуры в мм или в единицах горизонтального размера пучка, серые линии – величина горизонтального эмиттанса, размер точек – поле в секступолях – акцептанс по импульсу. Динамическая апертура отражает эффективность инжекции, в то время как акцептанс по импульсу будет ограничивать время жизни пучка

Таблица 6.1. Сравнение параметров синхротрона EBS, структуры EBS с 40 секциями и структуры с 40 периодами и коротким магнитом в центре структуры (SB)

Параметры кольца	EBS	USSR 40 EBS cells	+SB
Периметр	844 м	1055 м	1100 м
Число периодов	32	40	40
Число бимлайнов	27 ID + 17 BM	34 ID	34 ID + 40 BM
Нат. гор. эмиттанс	140 пм·рад	68 пм·рад	70 пм·рад
Верт. эмиттанс	5 пм·рад	5 пм·рад	5 пм·рад
Разброс энергии σ_E/E , [$\times \cdot 10^{-3}$]	0.95	0.85	0.86
Коэф.упл. орбит	$8 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^{-5}$
Длина банча ($I=0$)	2.9 мм	2.7 мм	2.9 мм
Бетатронные частоты ν_x, ν_y	76.21, 27.34	95.21, 33.34	95.21, 33.34
Хроматизм	6, 4	12, 7.5	7, 6
Потери энергии на оборот	2.6 МэВ	2.1 МэВ	2.0 МэВ
Напряжение ВЧ	6.5 МВ	5.0 МВ	5.0 МВ
Частота ВЧ	352 МГц	352 МГц	352 МГц
Кратность обращения	992	1241	1294
Максимальный ток	200 мА	200 мА	200 мА

Отметим, что эмиттанс уменьшится с ростом поля вставных устройств. Это уменьшение трудно предсказать, и его величина может зависеть от параметров вставных устройств.

Кривая на рис. 6.2 показывает ожидаемое уменьшение горизонтального эмиттанса в зависимости от общей мощности излучения ID. При расчёте пренебрегли дисперсией внутри вставных устройств и на прямых участках. Более точные расчёты требуют учёта параметров вставных устройств. Однако эта кривая демонстрирует возможное улучшение эмиттанса после установки вставных устройств (в пренебрежении внутрисгустковым рассеянием).

На рисунке 6.4 представлена стандартная ячейка структуры ускорителя СИЛА. Длина данной ячейки была увеличена на 1,14 м по сравнению с ячейкой ESRF-EBF, чтобы обеспечить требуемые величины эмиттанса и блины орбиты. Магнитная структура соответствует структуре ESRF-EBS, за исключением дополнительного источника в центре ячейки. В таблице 6.2 приведены сравнения градиентов поля с градиентами в структуре EBS.

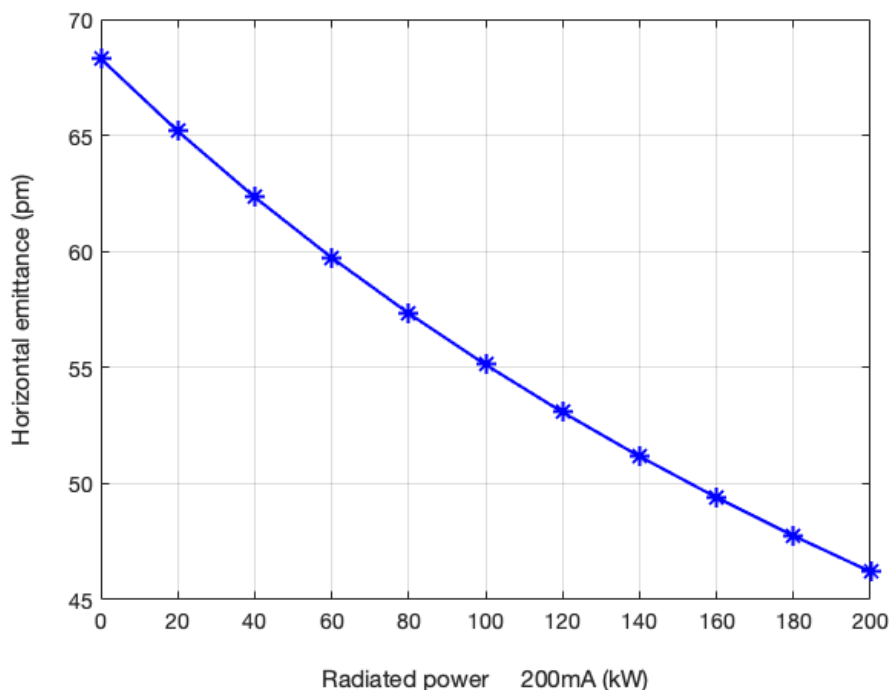


Рис. 6.2. Зависимость горизонтального эмиттанса от суммарной мощности, излучаемой вставными устройствами

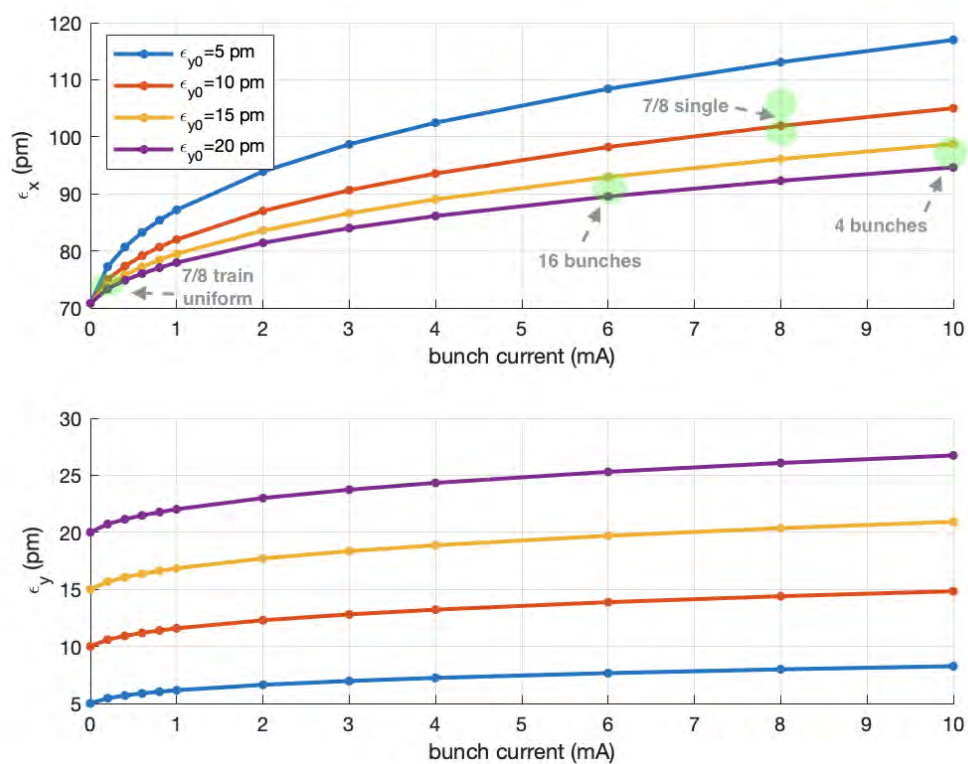


Рис. 6.3. Зависимости горизонтального (сверху) и вертикального (снизу) эмиттанса от тока сгустка вследствие внутрисгусткового рассеяния для начального (при нулевом токе) вертикального эмиттанса в 5, 10, 15 и 20 пм·рад. Зелёными областями отмечено различное число сгустков на орбите

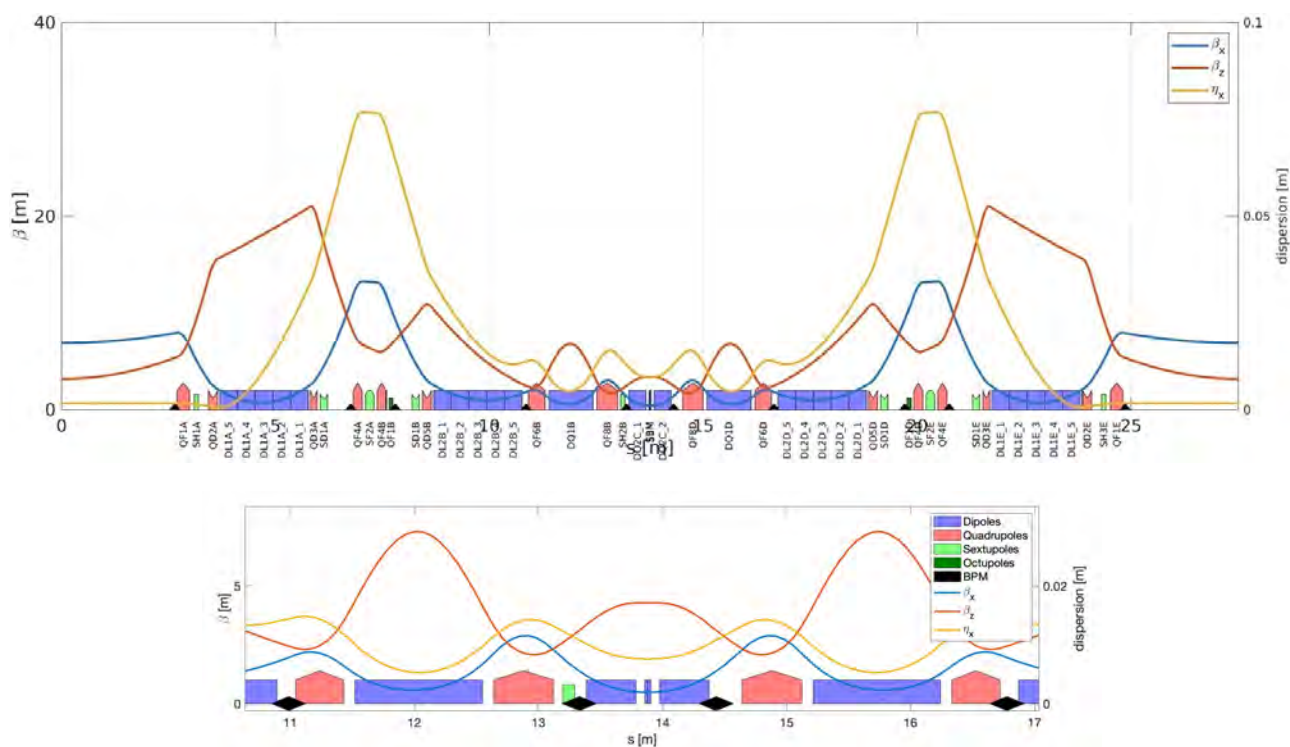


Рис. 6.4. Вверху – структура стандартной ячейки ускорителя СИЛА 9ВА (с короткими магнитами). Поля в магнитах даны в таблице 6.2 ниже. Внизу – увеличено показана центральная часть. Цветом обозначены: синий – диполи, оранжевый – квадруполы, салатный – секступоли, темно-зелёный – октуполи. Чёрные треугольники на верхнем рисунке и ромбы на нижнем - обозначают датчики положения пучка

Таблица 6.2. Величины полей в магнитах по типам, для синхротрона EBS, структуры СИЛА с 40 секциями и структуры СИЛА с 40 периодами и коротким магнитом в центре структуры (SB). DL1,DL2 – поворотные магниты с продольным градиентом; DQ – диполь-квадруполь; QF,QD – квадруполы фокусирующие и дефокусирующие, SF,SD – секступоли фокусирующие и дефокусирующие, OD – октуполь дефокусирующий

Семейство магнитов	EBS	СИЛА 40 секций типа EBS	СИЛА 40 длинных секций + SB
DL1	0.17 – 0.67 Тл	0.14 – 0.54 Тл	0.13 – 0.53 Тл
DL2	0.17 – 0.54 Тл	0.14 – 0.43 Тл	0.13 – 0.43 Тл
QF1	53.48 Тл/м	53.49 Тл/м	49.88 Тл/м
QD2	-57.05 Тл/м	57.37 Тл/м	-47.65 Тл/м
QD3	-52.93 Тл/м	-52.78 Тл/м	-60.85 Тл/м
QF4	52.09 Тл/м	52.12 Тл/м	52.12 Тл/м
QD5	-57.84 Тл/м	-57.89 Тл/м	-49.89 Тл/м
QF6	91.03 Тл/м	91.21 Тл/м	87.82 Тл/м
DQ1	0.57 Тл -36.86 Тл/м	0.45 Тл -36.85 Тл/м	0.48 Тл -38.43 Тл/м
QF8	89.38 Тл/м	89.04 Тл/м	92.89 Тл/м
DQ2	0.78 Тл -31.18 Тл/м	0.63 Тл -31.09 Тл/м	0.52 Тл -31.09 Тл/м
SB	0.86 Тл	-	0.86 Тл
SD1AE	-1718 Тл/м ²	-2228 Тл/м ²	-2250 Тл/м ²
SF2	1657 Тл/м ²	2155 Тл/м ²	1833 Тл/м ²
SD1BD	-1617 Тл/м ²	2096 Тл/м ²	-1478 Тл/м ²
OD	36000 Тл/м ³	36000 Тл/м ³	44000 Тл/м ³

6.2. Выбор схемы инъекции

Система инъекции – важнейшая часть синхротронного источника. Её конструкция и характеристики в значительной мере влияют на режимы работы и характеристики машины. Основными критериями при выборе схемы инъекции являются эффективность инъекции и возмущение накопленного пучка в процессе инъекции. Также на выбор схемы инъекции может влиять акцептанс накопителя, характеристики инжектированного пучка и устойчивость всей системы.

6.2.1. Стандартная инъекция «off-axis»

Данная схема используется на большинстве синхротронных источников. Она состоит из септум-магнита и четырёх быстрых магнитов-кикеров. Септум используется чтобы направить инжектируемый пучок параллельно накопленному, а четыре кикера используются для создания удара по замкнутой орбите, который уменьшит расстояние между накопленным и инжектируемым пучками. Поле в кикере должно быть поднято до максимальной амплитуды, а затем возвращено к нулю в течение одного оборота. Минимальное расстояние между накопленным и инжектированным пучком определяется разделительным лезвием, используемым для защиты сохранённого луча от отклоняющего поля, толщиной и минимальным расстоянием, на котором два пучка могут приблизиться к лезвию, ограниченным в основном их размерами. Возмущения при инъекции зависят от того, насколько быстро снижается поле при ударе.

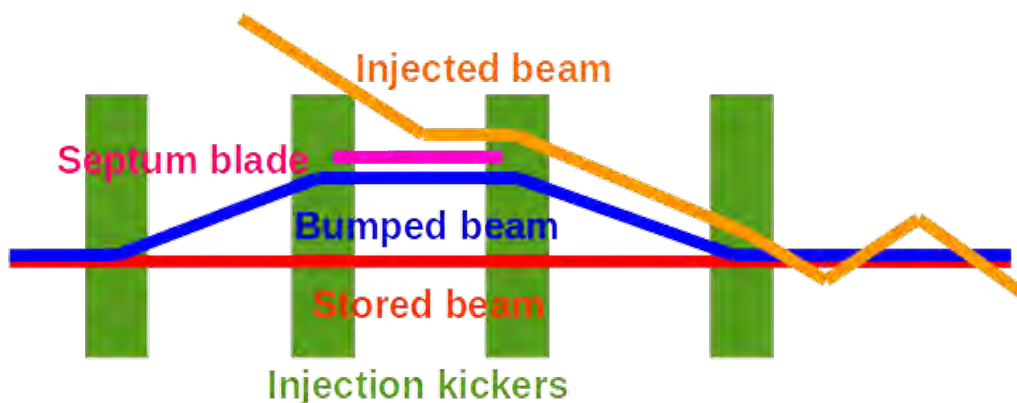


Рис. 6.5. Схема стандартной off-axis инъекции. Красным – накопленный пучок, синим – пучок, отклонённый к септуму (пурпурный) оранжевый – инжектированный пучок. После снятия поля в кикере накопленный пучок теоретически остаётся на замкнутой орбите, в то время как инжектированный колеблется вокруг него до тех пор, пока он не затухнет за счёт синхротронного излучения

Эффективность инъекции определяется амплитудой этих колебаний инжектированного пучка, сечением инжектируемого пучка и поперечным акцептансом накопительного кольца. Это проиллюстрировано на рисунке 6.6, где показан вид горизонтального фазового пространства. Показаны накопленный, отклонённый и инжектированный пучки, а также септум и горизонтальный акцептанс накопителя (динамическая апертура). Частицы, выпадающие за пределы горизонтального акцептанса – эллипса пунктирной линией – теряются. Поэтому off-axis injection требует достаточно большого горизонтального акцептанса, способного вместить инжектируемый и отклонённый накопленные пучки, а также септум.

Горизонтальный акцептанс, как правило, увеличивают за счёт введения большой горизонтальной бета-функции в точке инъекции. Это может быть достигнуто путём пере-

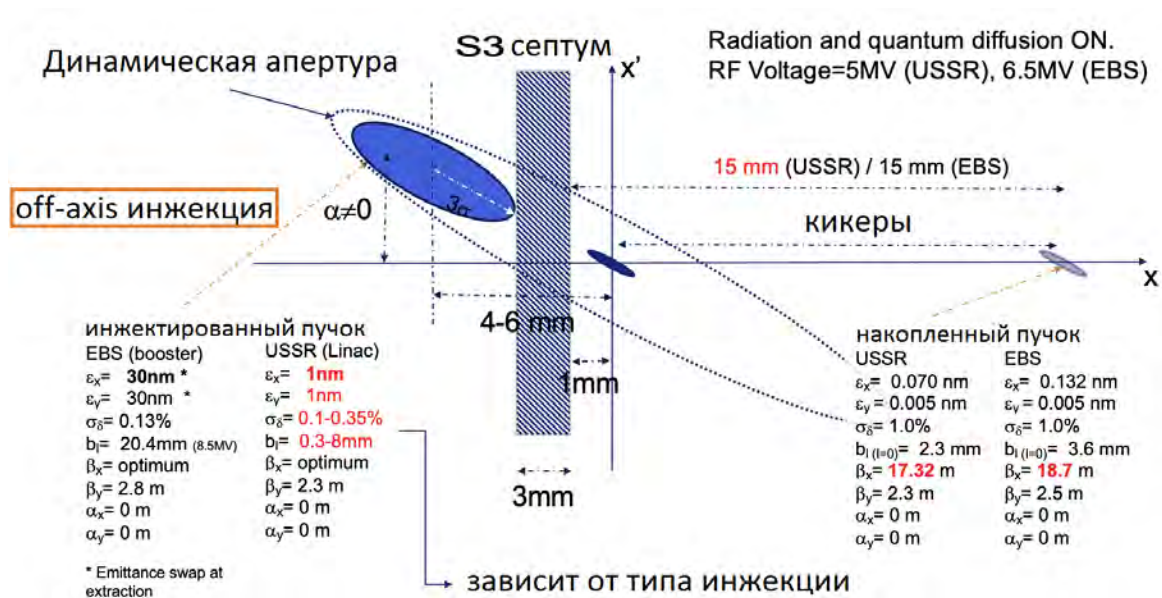


Рис. 6.6. Структура горизонтального фазового пространства в точке инжекции

стройки двух секций предназначенных для инжекции и добавления двух фокусирующих квадрупольей в прямом промежутке.

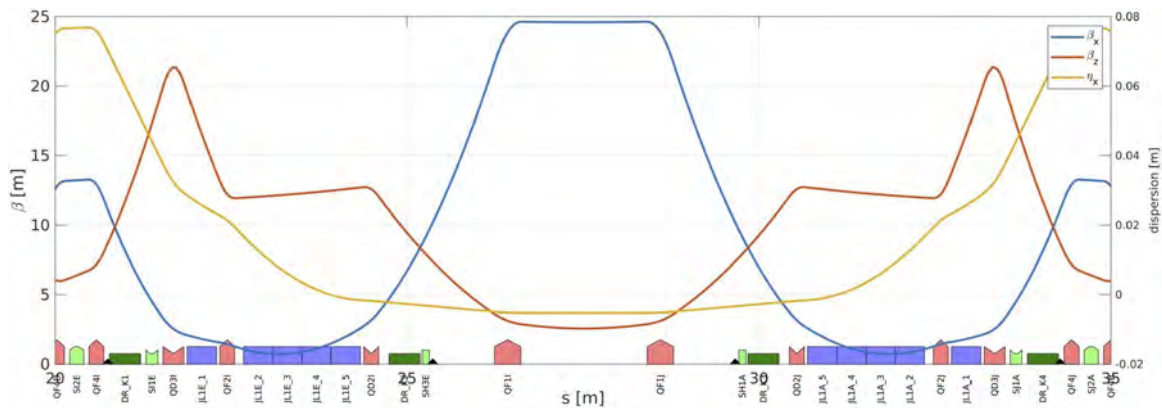


Рис. 6.7. Магнитная структура в точке инжекции

Структура такой секции показана на рисунке 6.7. Горизонтальная бета-функция в точке инжекции увеличена до 22 м, чтобы обеспечить лучшую эффективность. Используя эту компоновку, можно подобрать угол отклонения четырёх кикеров и обеспечить смещение замкнутой орбиты на 15 мм. Данная величина выбрана произвольно, отталкиваясь от существующей конструкции ESRF-EBS, с единственным ограничением, что данная апертура должна быть больше наименьшей существующей апертуры в накопителе. Например, в существующей конструкции ESRF-EBS, в случае расположения коллиматоров в области наименьшей величины бета-функции на $\pm 6 \text{ mm}$, септум может быть расположен на расстоянии до 10 мм от оси луча, что упрощает конструкцию кикера. Это скорее всего оптимистичная оценка, и она должна быть уточнена после проектирования коллимационной системы, однако данная величина может быть принята для дальнейших расчётов в отношении усовершенствованных схем инжекции в следующих разделах.

6.2.2. Усовершенствованные схемы инжекции

Стандартная схема инжекции вне оси при достаточно большом акцептансе накопителя осуществлять инжекцию с высокой эффективностью. Однако из-за неизбежных различий между четырьмя кикерами невозможно полностью погасить удар при инжекции и обеспечить полностью незаметную инжекцию. Для машины, проектируемой с нуля, как синхротрон СИЛА, следует рассмотреть на этапе проектирования и другие схемы, которые могут позволить достичь желаемой 100-процентной эффективности при отсутствии возмущений накопленного пучка.

Нами были рассмотрены следующие схемы:

- одиночный нелинейный кикер;
- выбивающая схема (swap-out);
- продольная инжекция;
- обмен колебаниями.

Ограничимся этими четырьмя методами, использующими один или несколько кикеров, со сложными мультипольными полями или с очень резкими фронтами нарастания и спада поля.

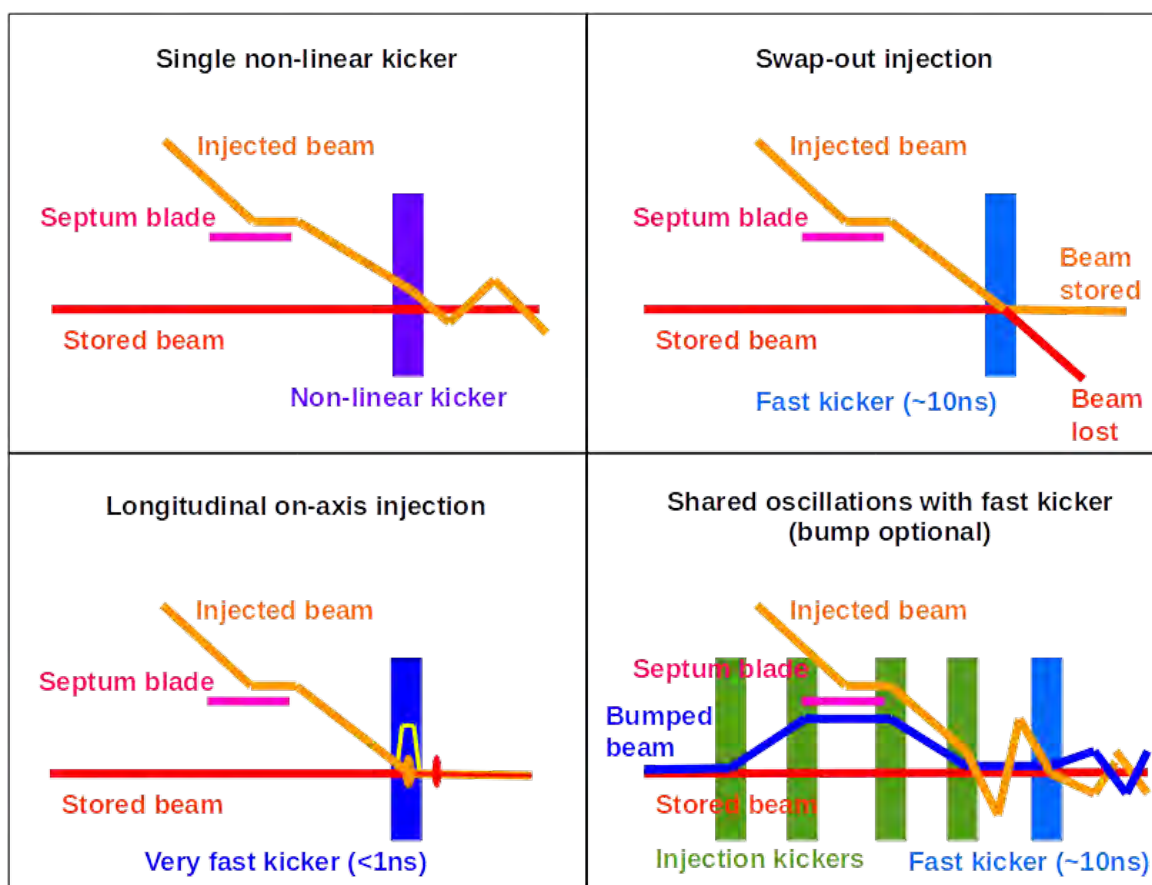


Рис. 6.8. Варианты схем инжекции – нелинейный кикер; выбивающая схема (swap-out); продольная инжекция; обмен колебаниями

Таблица 6.3. Варианты схем инжекции

Тип инжекции	Эффективность	Инжекционные возмущения	Характеристики кикера	Замечания
Стандартная off-axis	>90%, размер инжектируемого пучка, акцептанс кольца	Потенциально большие, компенсация возможна	Угол отклонения несколько мрад эквивалент одного оборота по кольцу	Хорошо отработана, легко запустить, нужен малый размер инжектируемого пучка
Нелинейный кикер	>90%, размер инжектируемого пучка, акцептанс кольца	Незаметны	Многополюсное поле угол удара порядка 1 мрад	Используется на MAXIV, инжекция с нелинейным полем требует малых инжектируемых пучков
Выбивающая инжекция Swap-out	100%	Незаметны	Угол удара несколько мрад длительность импульса ~ 10 нс	Нигде не реализована требуется источник и приёмник с полным током. Добавка в сгусток невозможна
Продольная инжекция	100%	Незаметны	Угол удара несколько мрад, длина импульса < 1 нс	Очень сложная конструкция кикера, технология не разработана
Обмен колебаниями Shared	100%	Незаметны без удара, потенциально возможны медленные кикеры	Угол удара доли мрад, длина импульса ~ 10 нс	Сочетает несколько методов, возможен поэтапный запуск, можно модернизировать до продольной инжекции

В таблице 6.3 приведены основные варианты схем инжекции, их достоинства и недостатки. Классическая схема инжекции а также инжекция с использованием нелинейного кикера обеспечивают недостаточную эффективность и существенно возмущают накопленный пучок, что не соответствует требуемым характеристикам синхротронного источника. Продольная инжекция представляется интересным решением, но требует решения серьезных технологических проблем и должен рассматриваться не для базового проекта, а скорее для потенциальной модернизации. Два оставшихся варианта – swap out инжекция, принятая в APS, а также shared колебания, предусмотренные для SLS и ESRF.

Выбивающая (swap out) инжекция обеспечит 100-процентную эффективность и полностью прозрачную инжекцию, но создание инжекционного комплекса, обеспечивающего требуемый заряд сгустка на базе бустерного синхротрона нетривиально, и скорее требует ЛИНАКА на полную энергию. Использование схемы инжекции с совместными колебаниями – shared – допускает докопление, и не имеет таких ограничений. Однако обеспечить незаметность инжекции для пользователей пучка в этой схеме затруднительно. В обоих случаях технология создания таких кикеров существует существует, хотя схема и требует доработок. Благодаря меньшему углу отклонения пучка схема shared инжекциикажется более простой в проектировании. Окончательное решение по схеме инжекции должно быть принято после того, как будет выбрана конструкция инжекционного ускорителя и зафиксированы параметры инжектируемых сгустков.

6.3. Экспериментальные станции комплекса СИЛА

6.3.1. Уточнение перечня станций первой очереди

При формировании списка экспериментальных станций для синхротрона СИЛА была поставлена задача создания сбалансированного набора, обеспечивающего проведение экспериментов с использованием всех востребованных методик.

В основу станций первой очереди легли базовые методы, наиболее востребованные в настоящее время на Курчатовском синхротронном источнике, а также перечень заявок российских пользователей на синхротрон ESRF.

К этим базовым методикам относятся:

- рентгеноструктурный анализ – исследования порошков, монокристаллов, макромолекулярных кристаллов;
- малоугловое рассеяние – исследование наночастиц, полимеров, разупорядоченных систем;
- спектроскопия поглощения рентгеновского излучения;
- фотоэлектронная спектроскопия;
- рентгеновская визуализация.

Вторая группа методик – методики, для реализации которых необходим источник именно четвёртого поколения, характеризующийся рекордными параметрами яркости, а также высокой степенью пространственной когерентности. К ним относятся:

- нанодифракция – то есть дифракция в нанометровых пучках;
- когерентные методы – CDI (когерентная дифракционная визуализация).

Методики, требующие высокой плотности потока фотонов:

- рентгеновская фотон-корреляционная спектроскопия;
- поверхностные методы;
- магнитное рассеяние.

Все эти методы позволяют получить уникальные научные результаты, исследовать образцы, которые не удаётся анализировать другими методами. Однако эти методы сложны в реализации, часто требуют больших временных затрат, уникальных объектов исследования, и, как следствие, число работ, выполняемых с использованием таких методов составляет, как правило, не очень большую долю в числе публикаций, хотя эти работы и демонстрируют рекордные, прорывные результаты.

Также важнейшей особенностью проектируемого источника является высокая энергия электронов – 6 ГэВ, что позволяет эффективно генерировать рентгеновские фотоны средних и, в особенности, высоких энергий.

Использование фотонов высоких энергий существенно расширяет функционал станций и позволяет реализовать большое число методик в режимах *in situ* и *in operando* – то есть изучать уже не модельные объекты, а проводить на станциях исследования промышленных образцов, проводить измерения в химических реакторах, в условиях высоких давлений, температур, магнитных полей. Кроме того, фотоны высоких энергий дают возможность анализировать элементы внутри крупных, массивных образцов, и изучать структуру уникальных артефактов, которая не может быть получена другими способами.

Размещение большинства экспериментальных станций запланировано в экспериментальном зале синхротронного источника. Габариты проектируемого зала позволяют разместить в нём станции общей длиной до 100 метров, считая от источника излучения и до задней стенки последнего защитного домика. Анализ существующих синхротронных источников и проектов их модернизации показывает популярность длинных и сверхдлинных каналов – длиной от 200 м до 1 км. Проект синхротронного источника СИЛА также предусматривает создание таких каналов. Сверхдлинные станции запроектированы во второй и, при необходимости, в последующих очередях строительства.

Излучение для сверхдлинных станций выводится по специальным тоннелям. Для размещения самих станций запланировано строительство четырёх отдельных корпусов. В каждый корпус приходит излучение от двух источников – ондуляторов прямолинейного промежутка, и соседнего короткого поворотного магнита, установленного в центре периода. Это позволяет разместить в одном здании две станции – одну, использующую непрерывный спектр, и вторую, использующую максимальную яркость источника, но требующую перестройки источника для сканирования по энергиям.

Размещение экспериментальной станции в отдельном корпусе позволяет решить две задачи. С одной стороны, большая длина канала формирует плоский волновой фронт, а также даёт возможность обеспечить фокусировку в пятно нанометровых размеров. С другой стороны, отдельный корпус обеспечивает специальный режим доступа к экспериментальной станции, отдельные системы вентиляции помещения.



Рис. 6.9. Корпус для размещения удалённой экспериментальной станции

Кандидатами для размещения в выносных корпусах являются:

- станция для работы с биологически опасными образцами;
- станция для работы с радиоактивными материалами и опасными химическими веществами;
- станция анализа процессов горения и взрыва;
- станция для исследования объектов культурного наследия и палеонтологии.

На последнем пункте хотелось бы остановиться подробнее. Исследование объектов культурного наследия предлагается выполнять изолированно от остального экспериментального зала по двум причинам. Во-первых, использование длинного канала позволит излучению разойтись на большой угол и даст возможность получать рентгеновские изображения относительно крупных предметов – до 1 м. Во-вторых, объектам культурного наследия требуются как правило, особые условия хранения, и в отдельном корпусе могут быть организованы специальные складские помещения, обеспечивающие сохранность уникальных образцов.

Перечень станций второй очереди пока не закончен, он будет формироваться позднее, основываясь на национальных потребностях и с учётом Федеральной программы «Наука».

В ходе работ по гранту CREMLINplus будут разработаны подходы к формированию концептуальных проектов (CDR) основных типов экспериментальных станций – дифракционных, спектроскопических и станций визуализации. Международный характер проекта позволит обобщить мировой опыт, и опираться на самые современные достижения ведущих европейских синхротронных центров – ESRF и DESY.

Таблица 6.4. Перечень станций первой очереди

Название	Область знаний	Энергия фотонов, кэВ	Источник
Многомасштабная визуализация	Исследование внутреннего строения объектов объектами размерами от 1 мкм до 1 м с разрешением 0.1 — 100 мкм	10—300	Ондулятор-револьвер + трехполосный вигглер
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 или U35
Малоугловое рассеяние и рентгеновская фотон-корреляционная спектроскопия	Молекулярная биология, синтез и само-упорядочение 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 in operando исследования	2—20	U35
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, наносистем, сильно коррелированные системы	0.1—2	UE125
Спектроскопия поглощения рентгеновского излучения	Электронная и атомная структура материалов, физика, химия, биология, геология, медицина, науки об окружающей среде	5—30	U35 + U42
Серийная кристаллография	Макромолекулярная кристаллография; структурная биология; изучение динамики процессов, происходящих в молекулах белков; исследование кристаллов микроразмера методами серийной кристаллографии	5—20	U24 или 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

6.3.2. Станция нанодифракции. Назначение

Синхротронная станция нанодифракции предназначена для проведения структурных исследований наноразмерных объектов (наночастиц, микрокристаллитов и др.), выявления отдельных структурных дефектов и структурных образований, микронапряжений и микродеформаций с использованием субмикронных и нанометровых пучков с временным разрешением до долей микросекунд. Станция будет использоваться для решения научных задач фундаментального и прикладного назначения в таких областях, как материаловедение, физика наносистем, физика конденсированных сред, нанотехнология и нанoeлектроника.

Получение новых знаний о материалах на наноуровне позволит вносить коррективы в технологический процесс формирования наносистем и управлять их физическими, опти-

ческими 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 существующие.

Для решения поставленных задач необходим синхротронный пучок с высокой яркостью и высокой степенью когерентности. Применение синхротронного пучка, обладающего указанными свойствами, открывает принципиально новый класс экспериментальных методик, планируемых к реализации на станции. Среди методик, основанных на пространственных характеристиках пучка, можно отметить метод нанодифракции (nanoXRD), рентгеновское картирование по поверхности (nanoXRD-mapping), а также флуоресцентное картирование. Использование когерентных свойств пучка позволит реализовать методы Брэгговской когерентной дифракционной визуализации (CDI) и птайхографии (ptyhography). На станции нанодифракции предлагается использование различных функциональных приставок для проведения in-situ и in-operando исследований.

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

6.3.3. Станция нанодифракции. Оптическая схема

При работе с субмикронными нанопучками особое внимание следует уделить стабильности положения пучка и минимизации искажений, которые могут быть вызваны как температурной, так и механической нестабильностью оптической системы. Поэтому каждый хатч должен быть оборудован системой климат-контроля для создания и поддержания заданной температуры и уровня влажности.

Источником синхротронного излучения должен являться револьверный ондулятор.

Концептуальная схема станции нанодифракции и когерентного рассеяния должна быть основана на использовании колимирующих и фокусирующих элементов, а также монохроматоров, позволяющих получить монохроматизированный сфокусированный пучок, при этом не нарушив когерентность.

В первом оптическом хатче должны быть расположены:

- водоохлаждаемый радиационный затвор;
- водоохлаждаемое алмазное окно в медной оправе;
- монитор положения пучка на основе алмаза;
- водоохлаждаемые алмазные фильтры, покрытые золотом;
- первичные щели белого пучка, водоохлаждаемые;
- камера с люминофорной пластиной;
- система зеркал с охлаждением первого элемента и изгибным вторым элементом для коллимации розового пучка;
- щели розового пучка, водоохлаждаемые;
- камера с люминофорной пластиной;
- двухкристальный монохроматор с охлаждением первого кристалла;
- ионизационная камера;
- щели монохроматического пучка;
- камера с люминофорной пластиной;
- блок ввода поглотителей;
- затвор монохроматического пучка.

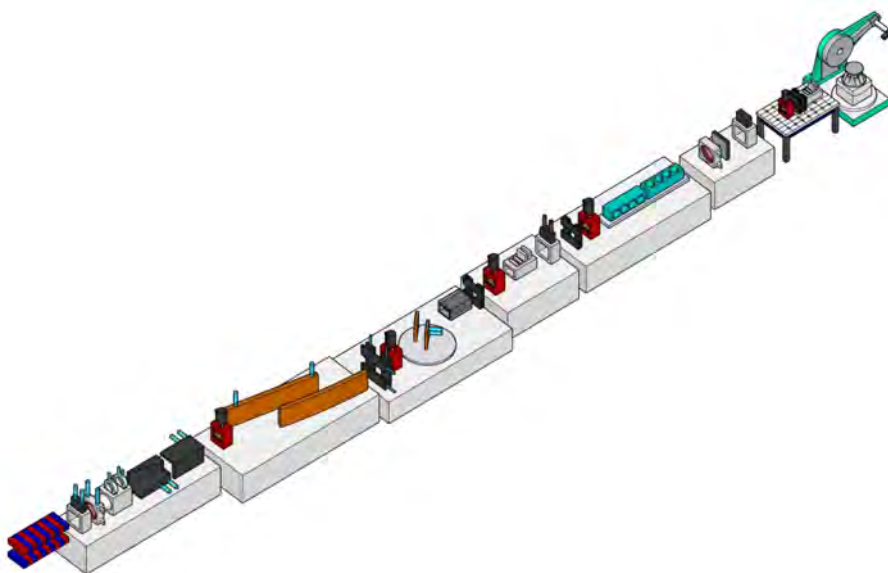


Рис. 6.10. Схема станции нанодифракции

В во втором оптическом хатче располагаются:

- цели для формирования пучка перед системой фокусировки;
- камера с люминофорной пластиной;
- трансфокатор с набором линз для горизонтальной и вертикальной фокусировки пучка.

В третьем оптическом хатче расположены:

- квадрантный монитор положения пучка;
- апертура / вторичный источник излучения;
- быстрый затвор.

В экспериментальном хатче должны быть расположены оптический стол для установки различных оптических элементов перед образцом, система щелей образца, фильтры, системы контроля и дополнительной фокусировки, а также многокружный гониометр образца с установленными детекторами.

Для создания розового пучка, отсечения высоких энергетических гармоник ондулятора, а также уменьшения тепловой нагрузки на последующие элементы применяются два рентгеновских зеркала установленных в вертикальной геометрии. Для минимизации вносимых в пучок искажений аберраций оптическими элементами, зеркала должны быть установлены в массивные теплоотводы с развитой системой поддержки.

В вертикальной позиции отражающая поверхность зеркала не изгибается под действием гравитации и остаётся плоской, не изменяя степень когерентности пучка и фронт пучка.

Сами зеркала представляют собой массивные кремниевые болванки сечением порядка 80 на 80 мм. Массивность зеркал позволяет им не деформироваться при рассеивании больших тепловых мощностей. Длина первого и второго зеркала для планируемой оптической системы синхротронной станции составит порядка 600 мм. Отражающая сторона должны быть отполирована с шероховатостью не хуже 4 Å. На кремниевую основу производится напыление тяжёлого металла. Зеркала устанавливаются на эвтектический раствор меж двух теплоотводов. Теплоотводы подводятся сверху и снизу зеркала, внутри проходит набор из нескольких контуров охлаждения, обеспечивающих равномерный теплоотвод по всей длине оптического элемента.

Первый зеркальный элемент – плоское охлаждаемое зеркало с напылением слоя родия для передачи энергии от 5 до 20 кэВ, в зависимости от угла падения. Также первый элемент служит для осаждения основной части тепловой нагрузки из остаточного, после фильтрующих элементов, белого пучка, тем самым предотвращая паразитные тепловые искажения на втором зеркальном элементе, требования к идеальности которого намного выше ввиду наличия системы фокусировки и коллимации. Второй зеркальный элемент также выполнен с напылением слоя родия для дальнейшей передачи выделенной области энергий.

Кинематическая схема зеркал белого пучка следующая: оба зеркала установлены на одну общую вращающуюся прецизионную ось с системой обратной связи и малым диапазоном движения. Для подобных конструкций широко распространено применение торсионных осей. Второе зеркало оборудуется подстроечной осью для точной установки параллельности между зеркалами. Глобальный отступ по горизонтали минимизируется за счёт малого расстояния между оптическими элементами.

Для монохроматизации целесообразнее использовать классические кристаллические монохроматоры Si (111) и Si (311), эффективно перекрывающие весь желаемый энергетический диапазон. Кристаллы должны быть установлены вертикально, что также обеспечивает стабильность их положения.

Первичную коллимацию и фокусировку лучше осуществлять с помощью рефракционных линз. Это надёжное, давно зарекомендовавшее себя решение. Применение только таких линз не позволит получить нанопучки. Поэтому для получения синхротронного пучка нанометрового размера целесообразнее использовать вторичную фокусирующую оптику. Это могут быть как зеркала Киркпатрик-Байеза, так и зонные пластинки Френеля.

6.3.4. Станция нанодифракции. Экспериментальное оборудование

При работе с нанопучками особое значение уделяется минимизации различных вибрационных и тепловых флуктуаций, а также прецизионное согласование осей вращения при сканировании вокруг узла обратной решётки. В связи с этим, целесообразной представляется схема с применением гексапода, Гексапод также обладает высокой нагрузочной способностью. Что позволяет разместить на нем не только стандартные среды окружения образца (нагрев, криостат и пр.), но и небольшую камеру для напыления или травления для проведения in-situ и in-operando исследований.

Позиционирование образца должно осуществляться с помощью оптического микроскопа и рентгеновского флуоресцентного детектора. Образец устанавливается на пьезоэлектрическую XY-подвижку, обеспечивающую субмикронную точность при сканировании как в пошаговом, так и в непрерывном режиме и установленную на вертикальный Z-транслятор. Основными производителями пьезоэлектрических трансляторов являются компании Physik Instrumente, SmarAct, Newport.

Для предварительной настройки образца и вывода его в дифракционные условия целесообразно использовать сцинтилляционный 0D и энергодисперсионный детекторы, а также лавинный фотодиод. Сцинтилляционный 0D детектор должен обладать большим динамическим диапазоном и высокой скоростью считывания (не менее 10⁶ импульсов/секунду). Лавинный фотодиод может также использоваться для настройки эксперимента. Среди 0D детекторов синхротронного излучения можно отметить зарубежные детекторы Huber и CyberStar и отечественные сцинтилляционные детекторы компании Радикон. Зачастую, единственной возможностью позиционирования исследуемой области при проведении нанодифракционных экспериментов является применение флуоресцентного детектора. Использование флуоресцентного детектора Amptek можно рассматривать для настройки образца в случае, когда исследуемый наноразмерный объект содержит в

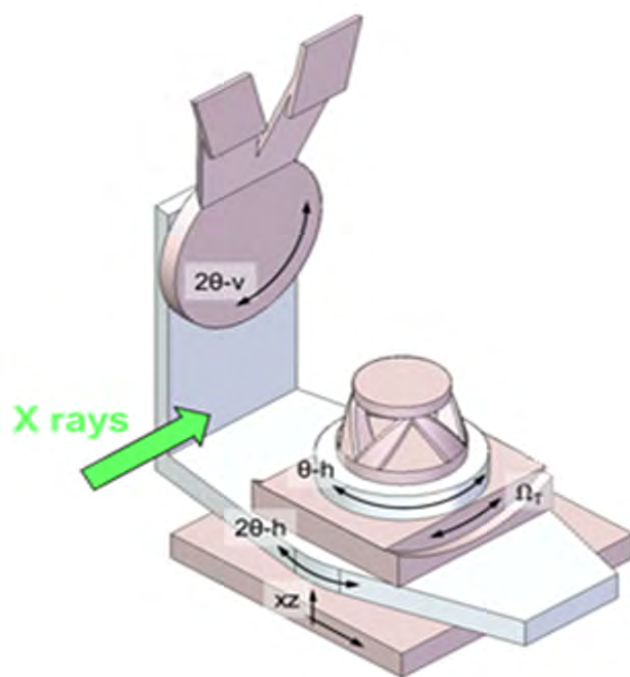


Рис. 6.11. Гониометрическая система на базе гексапода

себе маркер (включения), сильно отличающийся в энергетическом диапазоне от основной матрицы, поскольку эти детекторы обладают низким энергетическим разрешением, которого может быть недостаточно для точного разделения энергетических линий в исследуемом объекте и окружающей его матрицы. Если требуется настройка с высоким энергетическим разрешением для прецизионного позиционирования исследуемой области, то рекомендуется использовать флуоресцентные детекторы Roentec и Vortex на основе кремниевого дрейфового диода. Такие детекторы можно использовать и при проведении флуоресцентного картирования с высоким энергетическим разрешением.

Дифракционные исследования на нанодифрактометре с использованием нанопучков следует проводить с двумерными детекторами. Существует несколько двумерных детекторов, обладающих разными характеристиками. Например, Eiger 4M компании Dectris обладает большим зрительным полем и сравнительно небольшим размером пикселя – 75×75 мкм, детектор Lambda компании X-spectrum может быть использован в случае высокоразрешающих дифракционных экспериментов, поскольку размер пикселя 50×50 мкм, однако рабочее поле существенно меньше, чем у Eiger 4M. Возможно также, что компания X-spectrum может изготовить детекторы с большим зрительным полем. Поэтому продукция этой компании оптимальна для использования на станции нанодифракции и когерентного рассеяния на инструменте нанодифрактометр.

6.3.5. Станция нанодифракции. Кадровые потребности

Опыт зарубежных синхротронных центров показывает, что для обеспечения функционирования бимлайна должны быть включены:

- научные сотрудники (как минимум, три), обладающих экспертным уровнем знаний в области реализуемых методик технологического обеспечения, и круга решаемых задач;
- аспиранты и докторанты, решающих как свои задачи, так и оказывающих пользователям помощь в проведении экспериментов – 2 и более;

- технический специалист для поддержания станции в рабочем состоянии – один.

Деятельность этих сотрудников в основном должна быть направлена на поддержание работы бимлайна, формирование программы его развития, консультация пользователей бимлайна. В небольшой части времени – порядка 10 процентов, проведения собственных исследований.

Помимо основного персонала станции помощь в обслуживании станции и оперативном или плановом ремонте, апгрейде и адаптации оборудования пользователей могут оказывать члены специальных отделов синхротронного источника: оптической группы, детекторной группы, механической группы, группы вакуумного оборудования и группы программистов.

Глава 7

Список публикаций сотрудников комплекса

Биомедицинские исследования

1. Novikova N., Kovalchuk M., Konovalov O., et al. X-Ray Reflectivity and Diffraction Studies of Doxorubicin Binding to Model Lipid Membranes // *Bionanoscience*. 2020. V. 10(3). P. 618–624
2. Subach O. M., Sotskov V. P., (...) Lazarenko V.A., et al. Novel Genetically Encoded Bright Positive Calcium Indicator NCaMP7 Based on the mNeonGreen Fluorescent Protein // *International Journal of Molecular Sciences*. 2020. V. 21(5). P. 1644.
3. Timofeev V.I., Zhukhlistova N.E., Kuranova I.P. Features of the Three Dimensional Structure of the Mutant Form of *Wolinella succinogenes* L-Asparaginase in Complexes with L-Aspartic and L-Glutamic Acids // *Russian Journal of Bioorganic Chemistry*. 2020. V. 46(2). P. 140.
4. Turishchev S.Y., (...) Chumakov R.G., Lebedev A.M. et al. On the possibility of PhotoEmission Electron Microscopy for *E. coli* advanced studies // *Results in Physics*. 2020. V. 16. P. 102821.
5. Timofeev V. I., Zhukhlistova N. E., Kuranova I. P. Molecular Packing of a Mutant of L-Asparaginase from *Wolinella succinigenes* in Two Crystal Modifications // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65(4). P. 586.
6. Kosmachevskaya O.V., Nasybullina E.I. Shumaev K.B., Novikova N.N., Topunov A.F. Effect of Iron-Nitric Oxide Complexes on the Reactivity of Hemoglobin Cysteines // *Applied Biochemistry and Microbiology*. 2020. V. 56(5). P. 512.
7. Agapova Y.K., Komolov A.S., Timofeev V.I. Molecular Dynamics Calculations of the Interaction Energy of Imidazole Glycerol Phosphate Dehydratase from *Mycobacterium tuberculosis* with Triazole Derivatives // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65(5). P. 755.
8. Konovalov O. V., Novikova N. N., Kovalchuk M. V., Yalovega G. E., Topunov A. F., Kosmachevskaya O. V., Yurieva E. A., Rogachev A. V., Trigub A. L., (...) Yakunin S. N. XANES Measurements for Studies of Adsorbed Protein Layers at Liquid Interfaces // *Materials*. 2020. V. 13. P.4635.
9. Boyko K.M., Nikolaeva A.Y., Timofeev V.I., Popov V.O., Bezsudnova E.Y. Three-Dimensional Structure of Branched-Chain Amino Acid Transaminase from *Thermoproteus uzoniensis* in Complex with L-Norvaline // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65(5). P. 740.
10. Kuz'micheva G.M., Timaeva O.I., Novikova N.N., Yakunin S.N., Rogachev A.V., Svetogorov R.D., et al. Antimicrobial Activity of Composite Hydrogels in the Poly(N-vinylpyrrolidone)– $RE(NO_3)_3 \cdot xH_2O$ (RE Are Rare-Earth Ions) System // *Crystallography Reports*. 2020. Vol. 65(6), P. 922.
11. Folomeshkin M.S., (...), Prosekov P.A., Seregin A.Y. Refined Structure of Langmuir Lysozyme Films on Single-Crystal Silicon Wafers According to X-Ray Reflectivity Data // *Crystallography Reports*. 2020. Vol. 65(6), P. 827.
12. Petrenko D.E., Nikolaeva A.Y., Lazarenko V.A., Dorovatovskiy P.V., Timofeev V.I., et al. Crystallographic Study of Mutants and Complexes of Oligopeptidase B from *Serratia proteamaculans* // *Crystallography Reports*. 2020. Vol. 65(6), P. 909.

Науки о Земле и экология

13. Darin A.V., (...) Gogin A. A., Senin R. A., Degermendzhi A. G. Traces of the Tunguska Event (1908) in Sediments of Zapovednoe Lake Based on SR-XRF Data // *Doklady Earth Sciences*. 2020. V. 492(2). P. 442.
14. Trigub A.L., Trofimov N.D., Tagirov B.R. et al. Probing the Local Atomic Structure of In and Cu in Sphalerite by XAS Spectroscopy Enhanced by Reverse Monte Carlo Algorithm // *Minerals*. 2020. V. 10(10). P. 841.
15. Filimonova O.N., Tagirov B.R., Trigub A.L. et al. The state of Au and As in pyrite studied by X-ray absorption spectroscopy of natural minerals and synthetic phases // *Ore Geology Reviews*. 2020. V. 121. P. 103475.

Кристаллография и рост кристаллов

16. Atkinin I.I., Marchenkov N.V., Blagov A.E., Koval'chuk M.V. Simulation of Reciprocal Space Maps with the Use of Spectral Angular Diagrams in the Triple Crystal X-Ray Diffraction Scheme // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2020. V. 130(1). P. 7-13.
17. Kohn V.G., Targonsky A.V., Eliovich Y.A., (...), Blagov A.E., Kovalchuk M.V. Synchrotron radiation diffraction in a single crystal of paratellurite investigated with a new experimental scheme // *Journal of Synchrotron Radiation*. 2020. V. 27. P. 378.
18. Pavlyuk M.D., (...) , Subbotin I.A., Podurets K.M. et al. Mathematical Simulation of the Process of Growing a CdTe Single Crystal by the Obreimov–Shubnikov Method // *Physics of the Solid State*. 2020. V. 62(1). P. 1-7.
19. Svetogorov R.D., Dorovatovskii P.V., Lazarenko V.A. Belok/XSA Diffraction Beamline for Studying Crystalline Samples at Kurchatov Synchrotron Radiation Source // *Crystal Research and Technology*. 2020. V. 55(5). P. 1900184
20. Asadchikov V.E., Blagov A.E., (...) Protsenko A.I., Roshchin B.S., Targonskii A.V., Chukhovskii F.N. Lateral Inhomogeneities of Sapphire Plates Determined with the Aid of X-Ray and Probe Methods // *Technical Physics*. 2020. V. 65(3). P. 400.
21. Gureva P.V., Marchenkov N.V., Artemev A.N. et al. Measurement of single-crystal piezo modulus by the method of diffraction of synchrotron radiation at angles near pi // *Journal of Applied Crystallography*. 2020. V. 53. P. 734.
22. Egorysheva A.V., (...) Svetogorov R.D., Trigub A.L. // Synthesis, Structural Feature and Properties of Rosiait Structure Compound $BiGeSbO_6$ // *Ceramics International*. 2020. V. 46(6). P. 7413-7420.
23. Timofeev V.I., Zhukhlistova N.E., Kuranova I.P. Crystal Packing of Phosphopantetheine Adenylyltransferase from *Mycobacterium tuberculosis* in Two Crystal Modifications // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65(1). P. 84.
24. Popov V.V., (...) Khramov E.V., Svetogorov R. D., et al. Rearrangement in the local, electronic and crystal structure of europium titanates under reduction and oxidation // *Journal of Alloys and Compounds*. 2020. V. 831. 154752.
25. Lushnikov S.A., Kachalova L.A., Verbetsky V.N., Agafonov S.S. Structure of Hydride Phases Based on Intermetallic Compounds $ZrMoV$ and $ZrMo_{1.5}V_{0.5}$ of $C15$ Laves Phases // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65(3). P. 433.
26. Petrenko D.E., Nikolaeva A.Yu., Lazarenko V.A., et al. Screening of Conditions that Facilitate Crystallization of Oligopeptidase B from *Serratia Proteamaculans* by Differential Scanning Fluorimetry // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65(2). P. 264.
27. Kaziev G.Z., Stepnova A.F., Nguyen B.V., Dorovatovskii P.V. et al. Synthesis and characterization of the acid hexamolybdocobaltate(III) complex with amino acid glycine of composition $(H_3O)_3[CoMo_6O_{18}(OH)_6] \cdot (H_3NCH_2COO)(2)(H_2O)_5$ // *Russian Chemical Bulletin*. 2020. V. 69(5). P. 10 30.
28. Kuz'micheva G., Svetogorov R., Kaurova I. On symmetry of rare-earth scandium borate $RESc_3(BO_3)_4$ ($RE = Ce, Nd$) laser crystals // *Journal of Solid State Chemistry*. 2020. V. 288. P. 121393

29. Blanter M.S. Borisova P.A. Brazhkin V.V. et al. Effect of deuterium on phase transformations in a mixture of amorphous-like fullerenes C_{60}/C_{70} (50/50) at high temperature and pressure // *Materials Chemistry and Physics*. 2020. V. 251. P. 123094.
30. Koshevoi E.I. Samsonenko D.G., Dorovatovskii P.V. et al. Crystal Structure of Metal-Organic Coordination Polymers Based on Potassium and Barium Cations with alpha-Cyclodextrin // *Journal of Structural Chemistry*. 2020. V. 61(3). P. 431.
31. Elievich I. A., Akkuratov V. I., Blagov A. E., Buzanov O. A., Korghik M. V., Kulikov A. G., Pisarevsky Y. V., Prosekov P. A., Targonskii A. V., Kovalchuk M. V. Double- and Triple-Crystal X-Ray Diffraction Analysis of Face-Grown $Gd_3Ga_3Al_2O_{12}:Ce$ Crystals // *Journal of Surface Investigation*. 2020. V. 14(4). P. 655.
32. Golovina T.G., Konstantinova A.F., Timofeev V.I. Features of Optical Activity in Inorganic and Organic Materials // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65(5). P. 653.
33. Petrov A.A., Fateev S.A., Khrustalev V.N., Li Y.M., Dorovatovskii P.V. et al. Formamidinium Haloplumbate Intermediates: The Missing Link in a Chain of Hybrid Perovskites Crystallization // *Chemistry of Materials*. 2020. V. 32(18). P. 7739.
34. Khramov E.V., Privezentsev V.V., Palagushkin A.N. XAFS Study of Thermally Oxidated Sapphire Implanted with Zinc Ions // *Journal of Surface Investigation*. 2020. V. 14(6). P. 133.

Химия и катализ

35. Kazak A. V., Marchenkova M. A., (...) Rogachev A.V. et al. Self-organization of octa-phenyl-2,3-naphthalocyaninato zinc floating layers // *New Journal of Chemistry*. 2020. V. 44(10). P. 3833-3837.
36. Nikovskiy I., (...) Dorovatovskii P., Nodarak L., Tuna F., Nelyubina Y. Towards the Molecular Design of Spin-Crossover Complexes of 2,6-Bis(pyrazol-3-yl)pyridines // *Chem. Eur. J.* 2020. V. 26(25). P. 5629-5638.
37. Kononevich Y.N., (...) Dorovatovskii P. V., Sazhnikov V.A., et al. Tetrahedral Silicon-Centered Dibenzoyl-methanoboron Difluorides: Synthesis, Crystal Structure, and Photophysical Behavior in Solution and the Solid State // *ChemPlusChem*. 2020. V. 85(6). P. 1111-1119.
38. Glyzdova D.V., Afonasenkov T.N., Khramov E.V., et al. Zinc Addition Influence on the Properties of Pd/Sibunit Catalyst in Selective Acetylene Hydrogenation // *Topics in Catalysis*. 2020. V. 63. P. 139.
39. Akimova O.V., Veligzhanin A. A., Svetogorov R. D., et al. Kinetics of Hydrogen Absorption from a Gas Phase by Diffusion Filtering Pd-Y Membranes // *Physics of Metals and Metallography*. 2020. V. 121(2). P. 172.
40. Shikhaliyev N.G., Askerova U.F., (...) Dorovatovskii P.V. et al. Synthesis and Structural Study of Dichlorodiazadienes Derived from 4-Methoxybenzaldehyde // *Russian Journal of Organic Chemistry*. 2020. V. 56(2). P. 185.
41. Astakhov G.S., (...) Dorovatovskii P.V., Shul'pin G.B. Coordination Affinity of Cu(II)-Based Silsesquioxanes toward N,N-Ligands and Associated Skeletal Rearrangements: Cage and Ionic Products Exhibiting a High Catalytic Activity in Oxidation Reactions // *Inorganic Chemistry*. 2020. V. 59(7). P. 4536.
42. Chetverikova V.A., Popov L.D., (...) Lazarenko V.A. et al. Synthesis, Structural, and Physico-Chemical Study of Transition Metal Complexes with Schiff Base: A Product of Condensation of 2-N-Tosylaminobenzaldehyde and Tryptamine // *Russian Journal of General Chemistry*. 2020. V. 90(3). P. 418.
43. Nikovskii I.A., Polezhaev A.V., Aleshin D.Y., Mel'nikova E.K., Dorovatovskii P.V., Nelyubina Y.V. Iron(II) and Cobalt(II) Complexes with 2,6-Bis(1,4-Diphenyl-5-Hydroxy-1H-Pyrazol-3-yl)pyridine: Synthesis, Structures, and Spin States // *Russian Journal of Coordination Chemistry*. 2020. V. 46(5). P. 317.
44. Krasnov K.A., Krasnova A.A., Kartsev V.G., Dorovatovskii P.V. et al. Stereodirected synthesis of alkaloid-like quinolizidine systems // *Natural Product Research*. 2020. V. 34(2). P. 269.
45. Rubina M., Shulenina A., Svetogorov R., Vasilkov A. Metal-Chitosan Nanocomposites: A Perspective Way to Preparation, Morphology, and Structural Studies // *Macromolecular Symposia*. 2020. V. 389(1). P. 1900067.

46. Marakulin A.V., Lysova A.A., Samsonenko D.G., Dorovatovskii P.V., et al. New one-, two-, and three-dimensional metal-organic frameworks based on magnesium(II): synthesis and structure // Russian Chemical Bulletin. 2020. V. 69(2). P. 360.
47. Ushakov I.E., (...) Dorovatovskii P.V., Vologzhanina A.V. Crystal structures of (*E*)-5-(4-methylphenyl)-1-(pyridin-2-yl)pent-2-en-4-yn-1-one and [3,4-bis-(phenylethynyl)cyclobutane-1,2-diyl]bis(pyridin-2-ylmethanone) // Acta Crystallographica. Section E-Crystallographic Communications. 2020. V. 76. P. 192.
48. Astakhova G.S., (...) Dorovatovskii P.V., Shubina E.S., Bilyachenko A.N. Cu(II)-silsesquioxanes as efficient precatalysts for Chan-Evans-Lam coupling // Journal of Organometallic Chemistry. 2020. V. 906. P. 121022.
49. Buravchenko G.I., Scherbakov A.M., Korlukov A., Dorovatovskii P.V., Shchekotikhin A.E. Revision of the Regioselectivity of the Beirut Reaction of Monosubstituted Benzofuroxans with Benzoylacetone. 6-Substituted quinoxaline-2-carbonitrile 1,4-dioxides: Structural Characterization and Estimation of Anticancer Activity and Hypoxia Selectivity // Current Organic Synthesis. 2020. V. 17(1). P. 29.
50. Mikhaylov A.A., Kuleshov A.V., (...) Dorovatovskii P.V., et al. Imidazol-5-one as an Acceptor in Donor-Acceptor Cyclopropanes: Cycloaddition with Aldehydes // Organic Letters. 2020. V. 22(7). P. 2740.
51. Rubina M.S., Elmanovich I.V., (...) Svetogorov R.D. et al. Chitosan aerogel containing silver nanoparticles: From metal-chitosan powder to porous material // Polymer Testing. 2020. V. 86. P. 106481.
52. Vlasenko V. G., Burlov A. S., (...) Trigub A. L., et al. Synthesis, characterization, and biological activity of Co(II), Ni(II), and Cu(II) complexes derived from N, N'-bis (2-N - tozylaminobenzylidene) diaminodipropyliminate ligand // Inorganica Chimica Acta. 2020. V. 510. P. 119766
53. Kuznetsov V.V., Volkov M.A., German K.E., et al. Electroreduction of pertechnetate ions in concentrated acetate solutions // Journal of Electroanalytical Chemistry. 2020. V. 869. P. 114090
54. Burlov A. S., (...) Lazarenko V. A., Khrustalev V. N. Cu(II) and Co(II) Complexes with (4Z)-4-[(2-Diethylaminoethylamino)methylene]-5-Methyl-2-Phenylpyrazol-3-one: Synthesis, Magnetic Properties, and Crystal Structures // Russian Journal of Coordination Chemistry. 2020. V. 46(7). P. 485.
55. Lemport P.S., Matveev P.I., Yatsenko A.V., Evsiunina M.V., Petrov V.S., Tarasevich B.N., Roznyatovsky V.A., Dorovatovskii P.V., et al. The impact of alicyclic substituents on the extraction ability of new family of 1,10-phenanthroline-2,9-diamides // RSC Advances. 2020. V. 10(44). P. 26022.
56. Kirichkov M.V., (...) Trigub A.L., Soldatov A.V. In Situ Time-Resolved Decomposition of beta-Hydride Phase in Palladium Nanoparticles Coated with Metal-Organic Framework // Metals. 2020. V. 10(6). P. 810.
57. Dyachenko I.V., Dyachenko V.D., Dorovatovsky P.V. et al. One-Pot Synthesis of Thieno[2,3-b]pyridine and Pyrido[3',2':4,5]thieno[3,2-d]pyrimidine Derivatives // Russian Journal of Organic Chemistry. 2020. V. 56(6). P. 974.
58. Trofimov N.D., Trigub A.L., Tagirov B.R. et al. The State of Trace Elements (In, Cu, Ag) in Sphalerite Studied by X-Ray Absorption Spectroscopy of Synthetic Minerals // Minerals. 2020. V. 10(7). P. 640.
59. Seifullina I. I., Skorokhod L. S., Pulya A. V., Vlasenko V. G., Trigub A. L., Rakipov I. M. Synthesis, Structure, and Properties of Co(2+) and Ni(2+) Complexes with the Product of Condensation of 2-(7-Bromo-2-oxo-5-phenyl-3H-1,4-benzodiazepin-1-yl)acetohydrazide and 1H-Indole-2,3-dione // Russian Journal of General Chemistry. 2020. V. 90(7). P. 1298.
60. Nevidomskaya D. G., (...) Trigub A.L., Mandzhieva S.S., Dorovatovskii P.V., Popov Y.V. Speciation of Zn and Cu in Technosol and evaluation of a sequential extraction procedure using XAS, XRD and SEM-EDX analyses // Environmental Geochemistry and Health. 2020. Online access.
61. Kuz'micheva G.M., (...) Svetogorov R.D., Rybakov V.B. Local structural features and composition of the Bi₄Ge₃O₁₂ : Dy³⁺ crystals: effect of doping concentration // CrystEngComm. 2020. V. 22(34). P. 5666.
62. Dyachenko I. V., Dyachenko V.D., Dorovatovsky P.V., et al. Synthesis and Properties of 3-Substituted 2H-Chromen-2-ones // Russian Journal of Organic Chemistry. 2020. V. 56(7). P. 1123.
63. Khramov E.V., Privezentsev V.V., Palagushkin A.N., Shcherbachev K.D., Tabachkova N. Y. XAFS and TEM Investigation of Nanocluster Formation in ⁶⁴Zn⁺ Ion-Implanted and Thermo-Oxidized SiO₂ Film // Journal of Electronic Materials. 2020. V. 49(12). P. 7343.

64. Kuznetsov V.V., Gamburg Y., Zhulikov V.V., Krutskikh V.M., Filatova E.A., Trigub A.L., Belyakova O.A. Electrodeposited *NiMo*, *CoMo*, *ReNi*, and electroless *NiReP* alloys as cathode materials for hydrogen evolution reaction // *Electrochimica Acta*. 2020. V. 354. P. 136610.
65. Gerber E., Romanchuk A.Y., Pidchenko I., Amidani L., Rossberg A., Hennig C., Vaughan G.B.M., Trigub A., et al. The missing pieces of the *PuO₂* nanoparticle puzzle // *Nanoscale*. 2020. V. 12(35). P. 18039.
66. Nagornyi A. V., Shlapa Yu. Yu., Avdeev M. V., Solopan S. O., Belous A. G., Shulenina A. V., Ivankov O. I., Bulavin L. A. Structural characterization of aqueous magnetic fluids with nanomagnetite of different origin stabilized by sodium oleate // *Journal of Molecular Liquids*. 2020.V. 312. P. 113430.
67. Glyzdova D. V., Afonasenkov T. N., Khramov E. V. et al. Liquid-phase acetylene hydrogenation over *Ag*-modified *Pd*/Sibunit catalysts: Effect of *Pd* to *Ag* molar ratio // *Applied Catalysis A-General*. 2020. V.600 P. 117627.
68. Garnovskii D.A., Vlasenko V.G., (...), S.I., Trigub, A.L. et al. Synthesis, structural, spectral studies, and DFT calculations of a series of mixed ligand complexes of a tridentate *N,N,S* pyrazole based aldimine and 2,2'-bipyridine. The first example of structurally characterized dimeric cadmium(II) adduct with unusual $\mu(2)$ -O-sulfonamido bridges // *Polyhedron*. 2020. V. 190. P. 114763.
69. Boulanger N., Kuzenkova A.S., Iakunkov A., Romanchuk A.Y., Trigub A.L. et al. Enhanced Sorption of Radionuclides by Defect-Rich Graphene Oxide // *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2020. V. 12(40). P. 45122.
70. Akimova O. V., Veligzhanin A. A., Svetogorov R.D. Kinetics of the Structure Evolution of Diffusion Membrane Filters of the *Pd* – *Y* System after Hydrogenation // *Journal of Surface Investigation*. 2020. V. 14(5). P. 867.
71. Iost K.N., Smirnova N.S., (...), Khramov E.V. et al. Study of the Interaction between Components at Different Stages of Preparing *Ru* – *Rb*/Sibunit Catalysts for the Decomposition of Ammonia // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2020. V. 94(11). P. 2201.
72. Sanina N.A., (...) Dorovatovskii P.V., Khrustalev V.N., Aldoshin S.M. Structure, nitric oxide (*NO*) generation and antitumor activity of binuclear tetranitrosyl iron complex with 4-aminothiophenolyl as nitrosyl ferredoxins mimic // *Journal of Coordination Chemistry*. 2020. Online access.
73. Sanchez-Lopez P., Kotolevich Y., Khramov E., Chowdari R.K. et al. Properties of Iron-Modified-by-Silver Supported on Mordenite as Catalysts for NO_x Reduction // *Catalysts*. 2020. V. 10(10). P. 1156.
74. Zubavichus Y.V., Grigor'ev S.A., Pushkarev A.S., Borisov M.M. et al. Structural and Chemical Transformations of Ruthenium, Cobalt, and Iron Clathrochelates Used as Electrocatalysts for a Hydrogen Evolution Reaction in a Water Electrolyzer // *Nanotechnologies in Russia*. 2020. V. 15(3-6). P.341.
75. Asachenko A.F., Topchiy M.A., Zelinskii G.E., Limarev I.P., Dorovatovskii P.V. et al. Extension of an Encapsulating Macrobicyclic Ligand Using the Palladium-Catalyzed Suzuki-Miyaura Reaction of a Diiodoclathrochelate Iron(II) Tris-Glyoximate with Reactive Halogen Atoms in Its Apical Substituents // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2020. V. 65(10). P. 1494.
76. Shokurov A.V., (...) Rogachev A.V., Yakunin S.N., Chvalun S.N., Arslanov V.V., Selektor S.L. Supramolecular control of the structure and receptor properties of an amphiphilic hemicyanine chromoionophore monolayer at the air/water interface // *Soft Matter*. 2020. V. 16(43). P. 9857.
77. Linko R.V., (...) Dorovatovskii P.V., Khrustalev V.N. Quantum-Chemical Simulation of the Structure of Charge-Transfer Complexes of 9,10-Phenanthrenequinone Nitro-Derivatives with Phenanthrene. Crystal and Molecular Structure of 1: 1 Complex of 2,4,7-Trinitro-9,10-phenanthrenequinone with Phenanthrene // *Russian Journal of General Chemistry*. 2020. V.90(10). P.1869.
78. Litvinova Y. M., (...) Dorovatovsky P.V., Lazarenko V.A., Mironov Y.V. Synthesis and Structure of Two Novel Metal-Organic Frameworks Based ON Cluster Anions $[Re_6Se_8(CN)_6]^{4-}$, Cations Tb^{3+} , and Isonicotinate Anions // *Journal of Structural Chemistry*. 2020. V. 61(10). P. 1630.
79. Yakovenko R.E., (...) Svetogorov R.D., Mitchenko S.A. Preliminary evaluation of a commercially viable Co-based hybrid catalyst system in Fischer-Tropsch synthesis combined with hydroprocessing // *Catalysis Science & Technology*. 2020. V. 10(22). P. 7613.
80. Kuznetsov V.V., Gamburg Y.D., (), Trigub A.L., et al. Hydrogen Evolution Reaction Electrocatalysts Based on Electrolytic and Chemical-Catalytic Alloys of Rhenium and Nickel // *Russian Journal of Electrochemistry*. 2020. Vol. 56(10), P. 821.
81. Troitskii S.Y., Belyakova O.A., Trigub A.L. Anoparticles of Platinum(II) Oxo-Hydrocomplexes: Composition, Structure, Formation Mechanism *Journal of Structural Chemistry*. 2020. V. 61(11). P. 1709.

82. Tereshchenko A. A., (...) Trigub A. L., Soldatov A. V. Synthesis and Description of Small Gold and Palladium Nanoparticles on CeO(2)Substrate: FT- IR Spectroscopy Data Journal of Surface Investigation. 2020. V. 14(3). P. 447.
83. Shmatko V. A., Myasoedova T. N., Trigub A. L., Yalovega G. E. X-ray Spectroscopic Studies of the Atomic and Electronic Structure of the PANI/Cu Nanocomposite Journal of Surface Investigation. 2020. V. 14(3). P. 479.
84. Kazak A.V., Marchenkova M.A., Smirnova A.I., Seregin A.Y., Rogachev A.V., et al. Floating layer structure of mesogenic phthalocyanine of A(3)B-type Mendeleev Communications. 2020. V. 30(1). P. 52.

Физика конденсированного состояния

85. Sobko M.A., Lushnikov S.A., Verbetsky V.N., Agafonov S.S. Structure of $(ZrTi)_{0.5}(VCrFe(Ni_{0.9}Cu_{0.1}))_{0.5}$ and $(ZrTi)_{0.5}(VMoFeNi)_{0.5}$ Based Deuterides. // Inorganic Materials. – 2020. – V. 56. – № 11. – P. 1106-1112. <https://doi.org/10.1134/S0020168520110138>
86. Лушников С.А., Качалова Л.А., Вербецкий В.Н., Агафонов С.С. Структура гидридных фаз на основе интерметаллических соединений $ZrMoV$ и $ZrMo_{1.5}V_{0.5}$ фаз Лавеса C15.// Кристаллография. – 2020. – Т. 65. – № 3. – С. 447-448.<https://doi.org/10.31857/S0023476120030200>
87. Karpov I.D., Irodova A.V., Kruglov V.S., Shavkin S.V., Em V.T. Analysis of internal stress in a tape substrate made of the AISI 310S stainless steel for the second-generation hts wires using neutron stress diffractometry / // Technical Physics – 2020. – V. 65 – № 7 – P.1051-1057. <https://doi.org/10.1134/S1063784220070063>
88. Karpov I. D., Em V. T., Artemiev D. M., Karpov I. G., Sadkin K. E., Ilyin A. V. Study of through-thickness stress distribution in steel double-V butt weld. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2020. – V. 14. – P. S35-S41. <https://doi.org/10.1134/S102745102007018>
89. Karpov I.D., Rylov S. A., Em V. T., Blagov A. E., Ivanov S. Y., Zemlyakov E. V., Babkin K. D. Neutron diffraction research of residual stress in metal plates deposited on rigid substrate by DLMD method // Journal of surface investigation: x-ray, synchrotron and neutron techniques. – 2020. – V. 14. – P. S79-S81. <https://doi.org/10.1134/S1027451020070198>
90. Karpov I.D., Em V.T., Mikula P. Two-directional stress-free comb sample for weld study by neutron diffraction. // Journal of surface investigation: x-ray, synchrotron and neutron techniques. – 2020. – V. 14. – P. S82-S84. <https://doi.org/10.1134/S1027451020070204>
91. Blanter M.S., Borisova P.A., Brazhkin V.V., Lyapin S.G., Filonenko V.P. Phase transformations of fullerene C70 with metals at high temperatures and pressure.// Materials Letters. – 2020. – V. 277. – Art. № 128307. <https://doi.org/10.31857/S0367676520070078>
92. Borisova P.A., Blanter M.S., Brazhkin V.V., Filonenko V.P. Phase Transformations in C60 Fullerene with Iron and Aluminum at High Pressures and Temperatures. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2020. – V. 84. – № 7. – P. 851-856. <https://doi.org/10.3103/S1062873820070072>
93. Blanter M.S., Borisova P.A., Brazhkin V.V., Lyapin S.G., Filonenko V.P., Kukueva E.V. 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. – 2020. – V. 251. – Art. № 123094. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2020.123094>
94. Nikolaev S.N., Emelyanov A. V., Chumakov R. G. et al. The Properties of Memristive Structures Based on $(Co_{40}Fe_{40}B_{20})(x)(LiNbO_3)(100-x)$ Nanocomposites Synthesized on SiO₂/Si Substrates// Technical Physics. 2020. V. 65(2). P. 243.
95. Lyashenko L. P., (...) Svetogorov R. D., Zubavichus Ya. V., Kolbanov I. V. Order-Disorder Structural Transformations in Highly Imperfect Fluorite-Derived R₂TiO₅-Based (R = Tm, Er) Solid Solutions.// Inorganic Materials. 2020. V. 56(2). P. 190-197.
96. Ryazanov A.I., Svetogorov R.D., Zubavichus Ya.V., et al. The Use of Synchrotron Radiation for Studying Superconducting Nb₃Sn Samples Irradiated by Fast Particle Beams. //Crystallography Reports. 2020. V. 65(3). P. 352.

97. Brzhezinskaya M., Svechnikov N.Yu., Stankevich V.G., et al. Characterization of amorphous hydrocarbon CD_x films ($x \sim 0.5$) for energy storage applications. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2020. V. 28(3). P. 173.
98. Kazak A.V., Marchenkova M.A., Smirnova A.I., Seregin A.Y., Rogachev A.V., Klechkovskaya V.V., Arkharova N.A., Warias J.E., Murphy B.M., Tereschenko E.Y., Usol'tseva N.V., Kovalchuk M.V. Floating layers and thin films of mesogenic mix-substituted phthalocyanine holmium complex. // Thin Solid Films. 2020. V. 704. P. 137952.
99. Schlegel M. C., Grzimek V., Guenther G., Svetogorov R., et al. Explaining water adsorption in one-dimensional channels in $AlPO_4 - 5$ on molecular scale. // Microporous and Mesoporous Materials. 2020. V. 304. P. 109201.
100. Golovkova E.A., Teplov A.A., Tsetlin M.B. et al. Effect of Friction on the Degree of Crystallinity of Composite Materials Based on Ultra-high-molecular-weight Polyethylene and Polytetrafluoroethylene with Quasicrystalline Filler Al-Cu-Fe. // Crystallography Reports. 2020. V. 65(4). P. 622.
101. Rabchinskii M.K., (...) Lebedev A.M., Chumakov R.G. et al. Unveiling a facile approach for large-scale synthesis of N-doped graphene with tuned electrical properties. // 2D Materials. 2020. V. 7(4). P. 045001.
102. Belova N.E., (...) Golovkova E.A., Kondratev O.A. Implantation of Silicon Ions into Sapphire: Low Doses. // Semiconductors. 2020. V. 54(8). P. 912.
103. Butova V.V., (...) Trigub A.L., Rusalev Y.V., Soldatov A.V. Synthesis of ZnO Nanoparticles Doped with Cobalt Using Bimetallic ZIFs as Sacrificial Agents. // Nanomaterials. 2020. V. 10(7). P. 1275.
104. Egorysheva A.V., Ellert O.G., Kiryankin D.I., Popova E.F., Svetogorov R.D. Unusual magnetic properties and thermal expansion in chromium pyrochlores Ln_2CrTaO_7 , $Ln = Y, Sm, Gd$. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2020. V. 513. P. 167226.
105. Domashevskaya E.P., Builov N.S., Ivkov S.A., Guda A.A., Chukavin A.I., Trigub A.L. XPS and XAS investigations of multilayer nanostructures based on the amorphous $CoFeB$ alloy. // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2020. V. 243. P. 146979.
106. Cherepanov V. M., Lebedev V.T., Borisenkova A.A. Fomin E.V., Artemiev A.N., Belyaev A. D., Knyazev G. A., Yurenka A. Y. Chuev M.A. et al. Valence and Coordination of Iron with Carbon in Structures Based on Fullerene $C - 60$ according to NGR Spectroscopy and EXAFS. // Crystallography Reports. 2020. V. 65(3). P. 404.
107. Akimova O.V., Veligzhanin A.A., Svetogorov R.D. et al. Strain-Induced Lattice Distortions of a Hydrogenated Palladium-Based Alloy // Russian Metallurgy. 2020. V. 10. P. 1151.
108. Smertin R.M., Polkovnikov V.N., (...) Trigub A.L. The Microstructure of Transition Boundaries in Multilayer Mo/Be Systems // Technical Physics. 2020. V. 65(11). P. 1800.
109. Parinova E.V., (...) Chumakov R.G., Lebedev A.M. et al. Peculiarities of electronic structure and composition in ultrasound milled silicon nanowires // Results in Physics. 2020. V. 19. P. 103332.
110. Pashaev E.M., Vasiliev A.L., Subbotin I.A., Prutskov G.V., Chesnokov Yu. M., Kovalchuk M.V. et al. Analysis of Structural Features of Periodic $Fe/Pd/Gd/Pd$ Multilayered Systems. // Crystallography Reports. 2020. Vol. 65(6), P. 985.

Культурное наследие

111. Kovalenko E. S., Murashev M.M., Stolyarova E.K., Podurets K.M., Glazkov V.P., Presnyakova N.N., Borisova P.A., Svetogorov R.D., Gogin A.A., Greshnikov E.A., Zaytseva I.E., Yatsishina E.B. Study of Medieval Russian Enamel Pendant Using a Complex of Nondestructive Methods // Crystallography Reports. – 2020. – V. 65. – № 6. – P. 1073-1080. <https://doi.org/10.1134/S106377452006019X>
112. Ковальчук М. В., Яцишина Е.Б., Макаров Н.А., Грешников Э.А., Анциферова А.А., Гунчина О.Л., Кашкаров П.К., Коваленко Е.С., Мурашев М.М., Ольховский С.В., Подурец К.М., Тимеркаев В.Б. Томографические исследования терракотовой головы из Керченской бухты // Кристаллография. – 2020. – Т. 65. – № 5. – С. 832-838. <https://doi.org/10.31857/S0023476120050124>
113. Макаров Н. А., Грешников Э.А., Зайцева И.Е., Подурец К.М., Коваленко Е.С., Мурашев М.М. Невидимые святыни. Вложения в средневековых крестах-энколпионах по данным комплексных аналитических исследований // Краткие сообщения Института археологии. – 2020. – №. 258. – С. 25-45. <https://doi.org/10.25681/IARAS.0130-2620.258>

114. Грешников Э. А., Пожидаев В.М., Малахов С.Н., Подурец К.М., Коваленко Е.С., Мурашев М.М., Глазков В.П., Говор Л.И., Преснякова Н.Н., Светогоров Р.Д., Дороватовский П.В., Трунькин И.Н. Исследования креста-энколпиона из Новодевичьего монастыря естественнонаучными методами // Российская археология. – 2020. – №. 4. – С. 165-183. <https://doi.org/10.31857/S086960630012633-5>
115. Tereschenko E.Yu., Presniakova N.N., Kovalenko E.S., et al. Cultural Heritage Studies at the Kurchatov Institute Using Synchrotron, Neutron, and Electron Microscopy Techniques // Materials Evaluation. 2020. V. 78(8). P. 935.
116. Nosova E.I., Weber D.I., (...), Svetogorov R.D., et al. Red Wax Seals: Reconstruction of Historical Technology // Nanotechnologies in Russia. 2020. Vol. 15(9-10), P. 558.
117. Kovalenko E.S., Podurets K.M., (...), Kovalchuk M.V. X-ray, Synchrotron, and Neutron Imaging of Metal Artifacts from the Chernaya Mogila (Black Grave) Burial Mound // Nanotechnologies in Russia. 2020. Vol. 15(9-10), P. 572.
118. Makarov N.A., Greshnikov E.A., Zaytseva I.E., Podurets K.M., Kovalenko E.S., Murashev M.M. Invisible Holy Relics. Relics and Materials Inserted in Medieval Reliquary Crosses Based on the Data from Comprehensive Analytical Studies // Kratkie Soobshcheniya Instituta Arkheologii. 2020. V. 258. P. 25.

Методики и инструменты

119. Dachs F., (...) Strikhanov M., Teterin P., Tikhomirov V., Tishchenko A.A., Vallazza E., Vorobev K., Zhukov K. Transition radiation measurements with a Si and a GaAs pixel sensor on a Timepix3 chip // Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometer
120. AALOZY J., (...) Strikhanov, M., Teterin, P., Tikhomirov V., Tishchenko A.A., van Beuzekom M., van der Heijden B., Vorobev K., Zhukov K. Studies of the spectral and angular distributions of transition radiation using a silicon pixel sensor on a Timepix3 chip // Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment. 2020. V. 961. P. 163681.
121. Potylitsyn A P., Sergeeva D. Yu., Strikhanov M. N., Tishchenko A.A. Diffraction radiation from a charge as radiation from a superluminal source in a vacuum // Physics-Uspekhi. 2020. V. 63(3). P. 303.
122. Timofeev A.V. On the Charged Particles' Acceleration in Crossed Fields// Plasma Physics Reports. 2020. V. 46(6). P. 653.
123. Savchenko A.A., Tishchenko A.A., Sergeeva D.Y., et al. Fine structure of angular distribution of x-ray transition radiation from multilayered radiator in Geant4 // Journal of Instrumentation. 2020. V. 15(6). P. C06024.
124. Eliovich I. A., Akkuratov V. I., Targonskii A. V., Prosekov P. A., Blagov A. E., Pisarevsky Y. V., Kovalchuk M. V. New Approach for Time-Resolved Reciprocal Space Mapping with Adaptive X-Ray Optics // Journal of Surface Investigation. 2020. V. 14(4). P. 756.
125. Tishchenko A. A., Sergeeva D. Y., Garaev D.I. On the reducing the number of equations in the problem of radiation of a cluster of interacting particles // Vestnik Sankt-Peterburgskogo Universiteta Seriya 10. 2020. V. 16(2). P. 144.
126. Chuev M.A., Prutskov G.V., Novikova N.N., Pashaev E.M., Konovalov O.V., Stepina N.D., Rogachev A.V., Yakunin S.N. Theoretical Approach to Analysis of X-Ray Grazing-Incidence Diffraction from 2D Crystals // Crystallography Reports. 2020. V. 65(5). P. 772.
127. Mikula P., Saroun J., Stammers J., Em V. High-Resolution Analysis Using Bent Perfect Crystal in Powder Diffraction: Part I // Journal of Surface Investigation. 2020. V. 14(S1). P. S146.
128. Mikula P., Saroun J., Stammers J., Em V. High-Resolution Analysis Using Bent Perfect Crystal in Powder Diffraction: Part II // Journal of Surface Investigation. 2020. V. 14(S1). P. S151.
129. Karpov I.D., Em V.T., Mikula P. Two-Directional Stress-Free Comb Sample for Weld Study by Neutron Diffraction // Journal of Surface Investigation. 2020. V. 14(S1). P. S82.
130. Karpov I.D., Em V.T., Artemiev D.M. et al. Study of Through-Thickness Stress Distribution in Steel Double-V Butt Weld // Journal of Surface Investigation. 2020. V. 14(S1). P. S35.
131. Sergeeva D.Y., Tishchenko A.A. On the Polarizability of a Cluster of Interacting Particles in Polarization Radiation // Physics of Atomic Nuclei. 2020. Vol. 83(10), P. 1489.

132. Pryanishnikov K. E., Fedin P. A., Kuibeda R. P., Khabibullina E. R., Bobyr N. P., Kulevoy T.V. Preparation and Performance of Irradiation Experiments on the HIPr-1 Heavy Ion Accelerator for Express Analysis of Tungsten and Steel // *Physics of Atomic Nuclei*. 2020. Vol. 83(10), P.1478.
133. Blagov A. E., (...), Korzhov V. A., Kovalchuk M. V. Study of the Peculiarities of the Effect of Redistributing Intensity in the Excitation of Acoustic Waves in X-Cut Quartz Crystals by Using Synchrotron Radiation // *Journal of Contemporary Physics-Armenian Academy of Sciences*. 2020. V. 55(4) . P. 376.
134. Butova V.V., (...) Trigub A.L., Soldatov A.V. Microwave Synthesis and Phase Transition in UiO-66/MIL-140A System // *Microporous and Mesoporous Materials*. 2020. V. 296. P. 109998.

Часть III

Приложения.

Справочные материалы

Экспериментальные установки ККСНИ

План экспериментального зала синхротрона

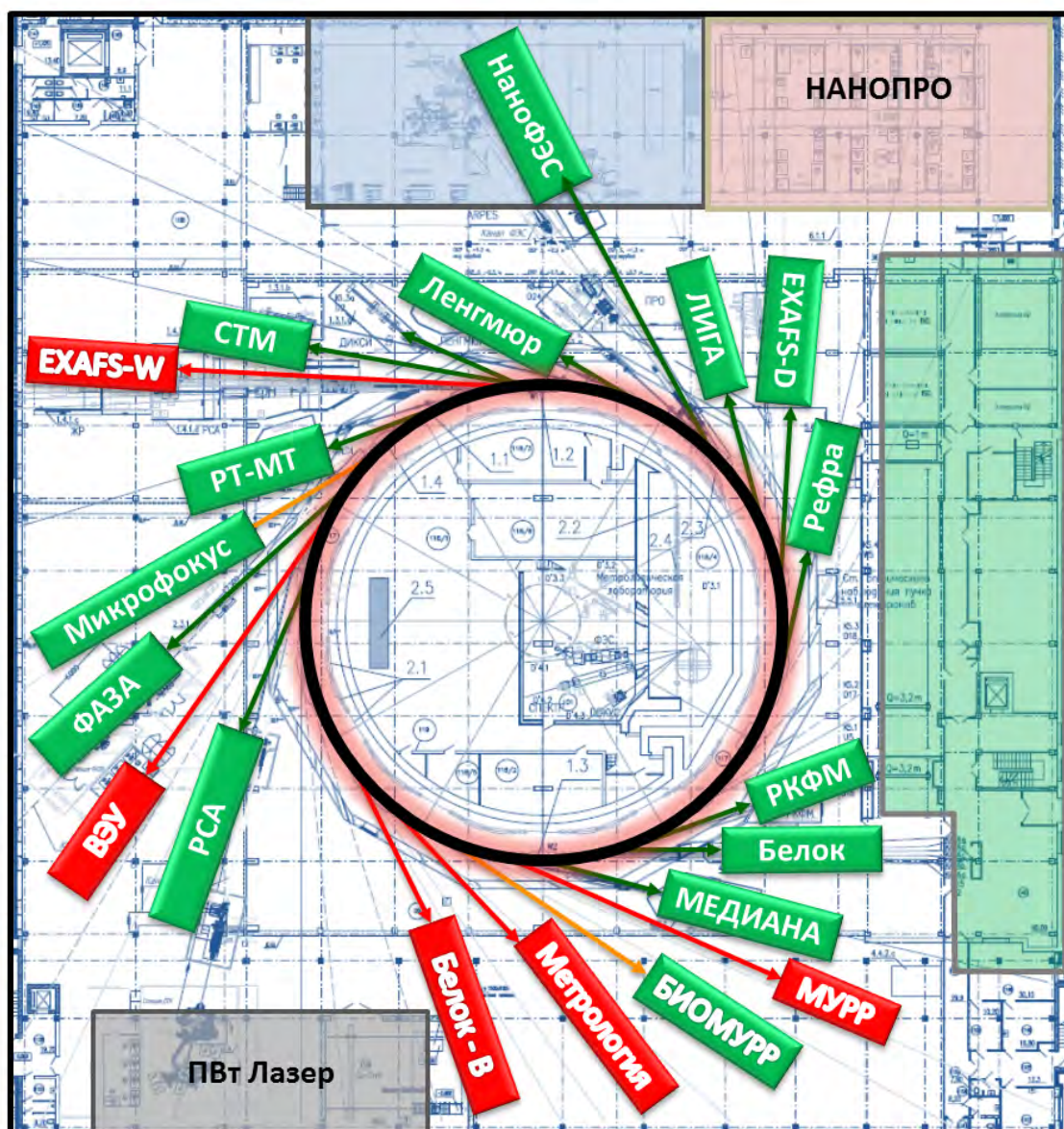


Рис. 1. План экспериментального зала синхротронного источника. Размещение экспериментальных станций. (зеленым – станции, введенные в эксплуатацию, красным – строящиеся)

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 $1.4 \times 0.3 \text{ мм}$.
4.4е. 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

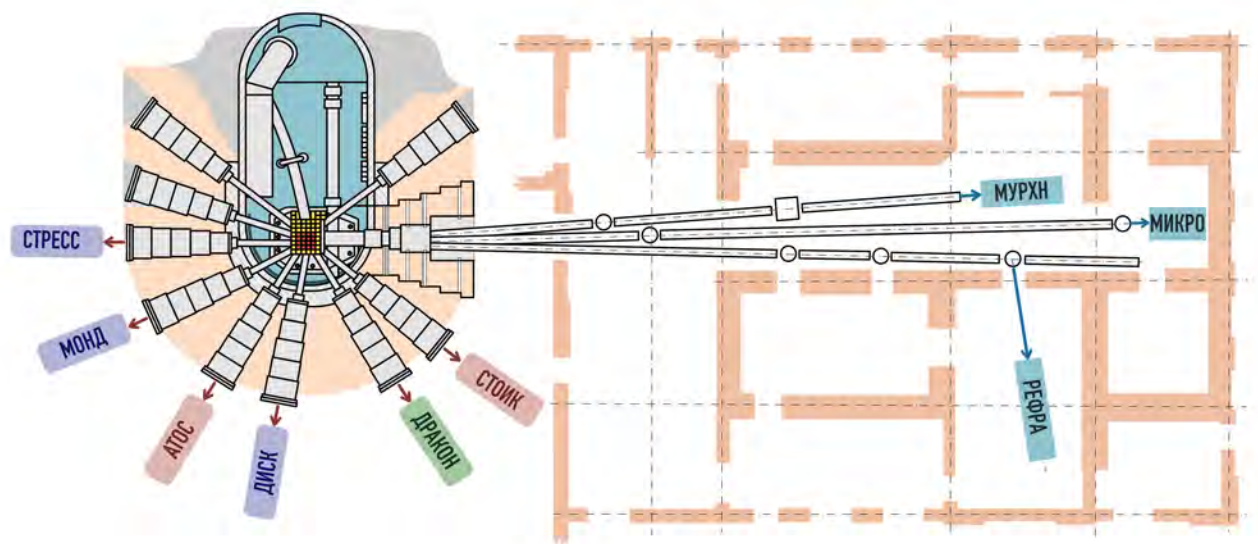


Рис. 2. Схема расположения станций УНУ НИК ИР-8 на поперечном разрезе реактора

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

**Курчатовский комплекс
синхротронно-нейтронных исследований.
Годовой отчёт
2020**

Печать цифровая. Тираж 40 экз. Заказ №41

Вёрстка в пакете L^AT_EX

Отпечатано в НИЦ «Курчатовский институт»
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д.1
© НИЦ «Курчатовский институт» 2021