

**КУРЧАТОВСКИЙ КОМПЛЕКС
СИНХРОТРОННО-НЕЙТРОННЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

**ГОДОВОЙ ОТЧЁТ
за 2024 год**

www.kcsni.nrcki.ru

Москва

Введение

НИЦ «Курчатовский институт» - один из ведущих научных центров мира. Он располагает уникальной инфраструктурой для проведения междисциплинарных исследований на переднем крае современной науки, «работая на опережение». Сегодня ключевую роль не только в фундаментальной науке, но и в разработке передовых прикладных технологий играют установки класса «мегасайенс» – такие как источники синхротронного излучения и исследовательские нейтронные реакторы. Они незаменимы в создании новых материалов, лекарств, развитии нефтехимии, энергетики и других критически важных сфер. Для поддержания и развития таких исследований в НИЦ «Курчатовский институт» был создан Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований (ККСНИ), который объединяет в себе возможности двух источников излучения – специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» и исследовательского нейтронного реактора «ИР-8». Такое взаимодополняющее сочетание делает ККСНИ уникальным и в мировом масштабе.

Ежегодно на научных установках ККСНИ выполняется более 150 экспериментов по заявкам от порядка 60 организаций-пользователей, включая научные институты, организации высшего образования, а также предприятия реального сектора экономики. По результатам проведенных исследований ежегодно публикуется более 130 научных статей в ведущих научных изданиях. Кроме того, «КИСИ-Курчатов» пользуется высоким спросом в качестве объекта инфраструктуры в рамках конкурсов Российского научного фонда «Проведение исследований на базе существующей научной инфраструктуры мирового уровня», третий раз подряд становясь самой востребованной мегаустановкой как по числу поданных заявок, так и по количеству поддержанных проектов, что подтверждает его высокую значимость для отечественной науки.

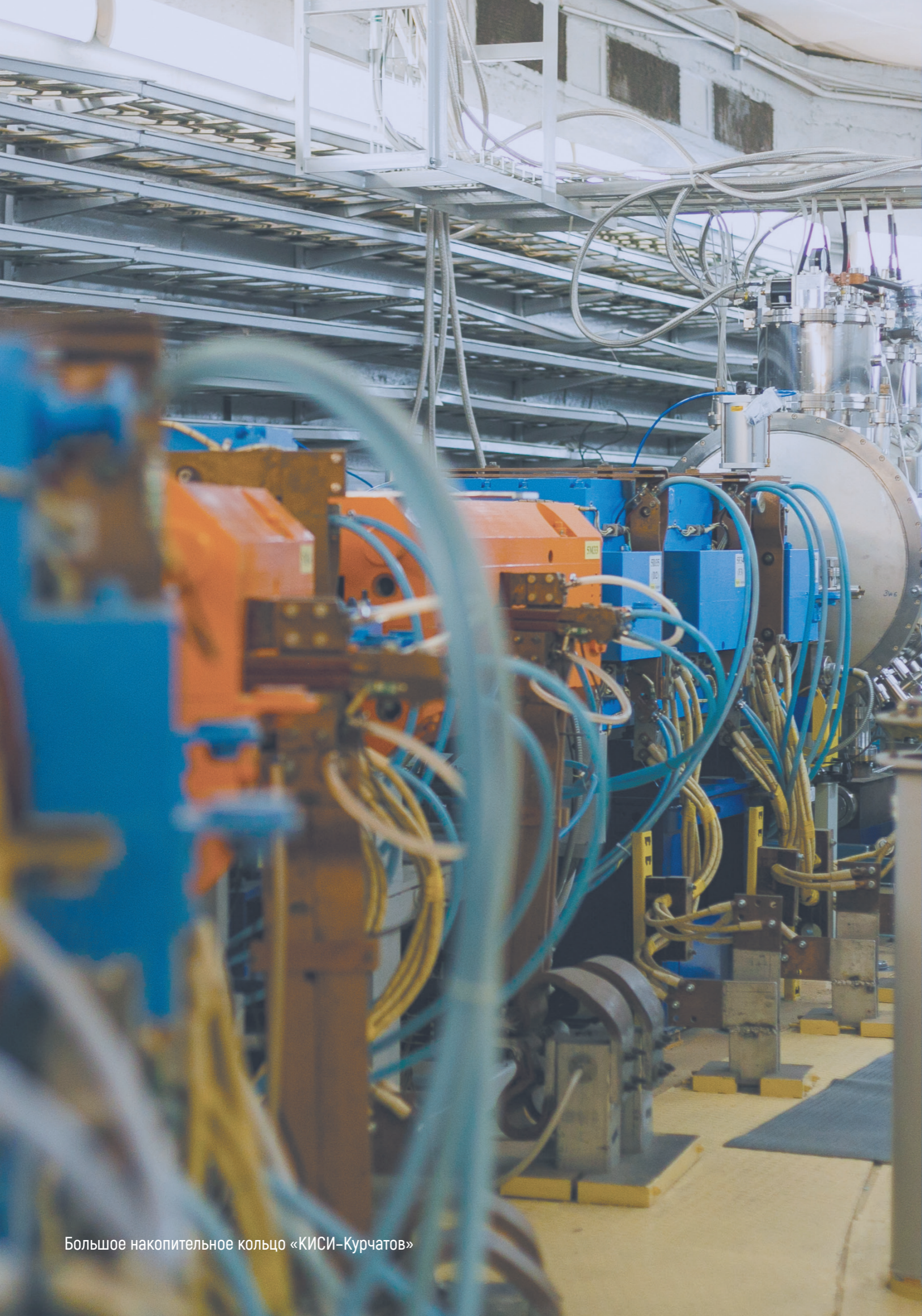
Важной задачей является также развитие функциональных возможностей исследовательских мегаустановок, включая введение в эксплуатацию новых современных экспериментальных станций на синхротроне «КИСИ-Курчатов» и реакторе ИР-8, а также строительство новых источников, позволяющих решать комплекс важнейших задач переднего края науки и новых технологий. Коллектив ККСНИ активно участвует в реализации крупнейших научных проектов класса «мегасайенс», предусмотренных Федеральной научно-технической программой развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструк-



туры на период до 2030 года и дальнейшую перспективу: создание принципиально нового источника синхротронного излучения «СИЛА», превосходящего по техническим характеристикам действующие и проектируемые международные источники СИ; модернизация единственного на постсоветском пространстве синхротрона «КИСИ-Курчатов» – самой востребованной научной мегаустановки в России; строительство уникальной научной установки (УНУ) класса «мегасайенс» «РИФ» на острове Русский и ввод в эксплуатацию технологического накопительного комплекса (ТНК) «Зеленоград» – центра «Московской технологической долины». Создание, эксплуатация и модернизация таких крупных установок для научных исследований – очень важная, стратегическая задача. Подобные мегаустановки национального уровня, благодаря их уникальным исследовательским возможностям, обеспечивают высокий уровень отечественной науки, технологическую независимость нашей страны.

Ковальчук Михаил Валентинович

Президент НИЦ «Курчатовский институт»,
научный руководитель Курчатовского комплекса
синхротронно-нейтронных исследований



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

Глава 1

ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О ТЕКУЩЕЙ РАБОТЕ КОМПЛЕКСА.....	9
1.1. Статистика работы источника синхротронного излучения (КИСИ) в 2024 году.....	10
1.2. Статистика работы исследовательского реактора ИР-8 в 2024 году.....	10
1.3. Работа уникальной научной установки специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» по заявкам пользователей в 2024 году.....	11
1.4. Работа уникальной научной установки нейтронного исследовательского комплекса на базе реактора ИР-8 по заявкам пользователей в 2024 году.....	14

Общие сведения о текущей работе комплекса

За отчетный 2024 год в ККСНИ на источниках синхротронного излучения и нейтронов были проведены эксперименты по 149 заявкам пользователей от 44 образовательных и научных организаций (ссылка на портал заявок – ниже). Сотрудниками ККСНИ были опубликованы более 100 научных статей в ведущих отечественных и зарубежных рецензируемых журналах.



Рисунок 1.1. – Распределение проводимых в ККСНИ исследований по областям науки, QR-код ведет на портал заявок

1.1. Статистика работы источника синхротронного излучения (КИСИ) в 2024 году

Таблица 1.1. – Статистические данные о работе ускорителя в 2024 г.

Полное время работы на пользователей (согласно календарному плану работы УНК)	3 040 ч
Фактическое время работы на эксперимент (пучок электронов с энергией 2.5 ГэВ)	1 635 ч
Суммарная наработка всех каналов вывода СИ, час	10 799 ч
Среднее количество работающих каналов вывода СИ	6.6

1.2. Статистика работы исследовательского реактора ИР-8 в 2024 году

Таблица 1.2. – Статистические данные о работе реактора ИР-8 в 2024 г.

Общее время работы реактора ИР-8 (мощность ~ 5 МВт)	3 780 ч
Суммарная наработка всех горизонтальных каналов ИР-8	13 056 ч
По заявкам организаций-пользователей	6 162 ч
По договорам и методической работе	6 894 ч
Среднее количество работающих горизонтальных каналов	5

1.3. Работа уникальной научной установки специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» по заявкам пользователей в 2024 году

«КИСИ-Курчатов» – единственный в постсоветском пространстве специализированный источник синхротронного излучения и самая востребованная установка класса «мегасайенс» в России. На синхротроне «КИСИ-Курчатов» ежегодно проводятся многочисленные структурные исследования в таких областях, как физика твердого тела, химия, материаловедение, биомедицина, а также изучение объектов культурного наследия. Значительная часть работ выполняется в сотрудничестве с различными подразделениями и партнерами НИЦ «Курчатовский институт», хотя многие исследования проводятся по заявкам внешних научных организаций.

В 2024 году для выполнения заявок научных коллективов были задействованы следующие экспериментальные станции:

1. Ленгмюр – рентгеновские исследования молекулярных пленок на поверхности жидкости (методы: рефлектометрия и стоячие рентгеновские волны).

2. Био-МУР – изучение структуры биологических объектов в статике и динамике (методы: дифракция и мало-/широкоугольное рассеяние).

3. Белок/РСА – определение пространственной структуры кристаллических образцов (высокоразрешающая порошковая и монокристаллическая рентгеновская дифракция).

4. ФАЗА – диагностика материалов (прецизионная дифрактометрия, рефлектометрия и фазочувствительные методы).

5. МикроФокус – рентгенофлуоресцентная спектроскопия и порошковая дифракция с микроразмерными пучками.

6. РКФМ (рентгеновская кристаллография и физическое материаловедение) – анализ структуры материалов методами дифракции и рассеяния.

7. СТМ (структурное материаловедение) – исследование функциональных материалов методом рентгеновской спектроскопии поглощения.

8. НаноФЭС – изучение электронной структуры твердых тел (фотоэлектронная, оптическая и зондовая спектроскопия).

9. РТ-МТ (рентгеновская топография и микротомография) – неразрушающая визуализация внутренней структуры биологических объектов.

10. МЕДИАНА – медицинская и материаловедческая диагностика, а также томография объектов культурного наследия.

11. ЛИГА – трехмерная визуализация методом рентгеновской компьютерной томографии.

Всего в 2024 году на экспериментальных станциях «КИСИ-Курчатов» было выполнено более 110 заявок на проведение исследований от 36 организаций-пользователей. Кроме того, часть экспериментального времени была отведена на проведение методико-диагностических работ и работ по модернизации экспериментальных установок.

Стоит отметить, что «КИСИ-Курчатов» третий раз подряд стал самой востребованной исследовательской установкой России в рамках конкурса Российского научного фонда по мероприятию «Проведение исследований на базе существующей научной инфраструктуры мирового уровня», выиграв максимально возможные 8 проектов.

Таблица 1.3. – Организации – пользователи синхротронного источника

№	Название организации	Затрачено часов	Выполнено заявок
1	Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»	1 622	26
2	Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова	532	12
3	Институт физики микроструктур РАН	409	1
5	Институт общей и неорганической химии РАН	334	5
6	Южный федеральный университет	314	5
7	Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН	282	2
8	Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН	271	3
9	Московский физико-технический институт	256	4
10	Объединенный институт ядерных исследований	182	2
11	Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН	175	3
12	Воронежский государственный университет	167	1
13	Институт нефтегазовой геологии и геофизики	138	4
14	Дальневосточный федеральный университет	125	5
15	Южно-Уральский государственный университет	90	4
16	Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН	88	1
17	Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН	84	3
18	МИРЭА – Российский Технологический Университет	67	3
19	Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»	60	4

20	Институт геологии Коми НЦ УрО РАН	50	1
21	Институт физики СО РАН	48	2
22	Палеонтологический институт им. А.А. Борисяка РАН	45	1
23	Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики	44	2
24	Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН	42	1
25	Сколковский институт науки и технологий	38	1
26	Институт молекулярной генетики НИЦ «Курчатовский Институт»	36	1
27	Почвенный институт им. В.В. Докучаева	35	3
28	Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН	34	1
29	Российский университет дружбы народов	33	1
30	Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН	24	3
31	Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И.П. Бардина	17	1
32	Белгородский государственный национальный исследовательский университет	10	1
33	Волгоградский государственный технический университет	9	1
34	Институт химических реактивов и особо чистых химических веществ Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»	4	1
35	Казанский федеральный университет	2	1
36	Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН	2	1

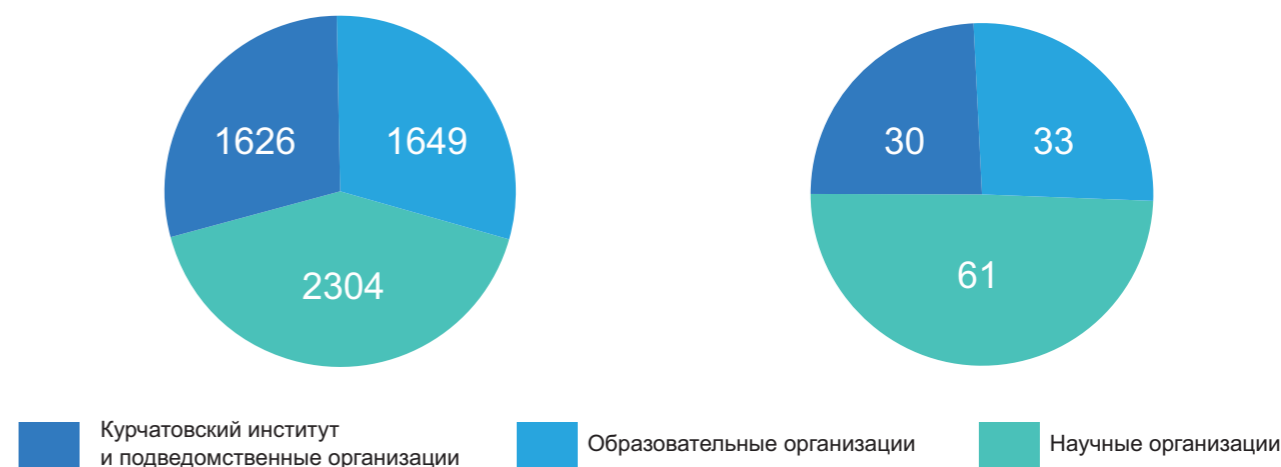


Рисунок 1.2. – Статистика работы УНУ «КИСИ-Курчатов». Слева: организации – пользователи синхротронного источника по количеству используемого времени, справа – по количеству заявок (суммарно 6401 ч. или 124 заявки)

1.4. Работа уникальной научной установки нейтронного исследовательского комплекса на базе реактора ИР-8 по заявкам пользователей в 2024 году

Таблица 1.4. – Статистические данные о работе реактора ИР-8

Общее время работы реактора ИР-8 (мощность ~ 5 МВт) на пользователей	3 780 ч
Суммарная наработка всех горизонтальных каналов ИР-8:	13 056 ч
По заявкам организаций-пользователей	6 162 ч
По договорам и методической работе	6 894 ч
Количество работающих горизонтальных каналов	5

Уникальная научная установка на базе реактора ИР-8 (НИК ИР-8) – это комплекс экспериментальных установок на выведенных нейтронных пучках горизонтальных каналов реактора ИР-8 (максимальная мощность 8 МВт).

В НИК ИР-8 проводят экспериментальные исследования с применением нейтронных пучков 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 внутреннего строения объектов методами нейтронной радиографии и томографии.

В 2024 году заявки принимались на 5 станций: ДИСК, предназначенной для проведения исследований атомной и магнитной структур порошковых материалов в экстремальных условиях методом нейтронной дифракции; МОНД, предназначенной для исследования атомной структуры монокристаллических образцов; СТОИК, предназначенной для исследования микро неоднородностей методом нейтронного ультрамалоуглового рассеяния; СТРЕСС, предназначенной для получения информации о деформациях и напряжениях внутри массивных поликристаллических объектов методом нейтронной стресс-дифрактометрии; ДРАКОН, предназначенной для изучения внутреннего строения объектов методами нейтронной радиографии и томографии.

В результате за 2024 год удалось выполнить исследования по 25 заявкам, поступившим на экспериментальные станции НИК ИР-8. Часть пучкового времени была затрачена на выполнение работ по развитию методик экспериментов, результаты которых представлены в отчетных материалах по научно-исследовательским работам отдела нейтронных экспериментальных станций. Были выполнены следующие научные работы:

- Методом порошковой дифракции исследовано влияние температуры и высокого давления на магнитные и структурные фазовые переходы в различных материалах; исследовано катионное распределение в структуре материалов, используемых в биомедицине; исследовано структур-

но-фазовое состояние и локализация атомов водорода в композитах на основе магния, никеля и сплавов редкоземельных металлов.

- Методом монокристаллической дифракции исследована атомная структура кристаллов-суперпротонов, уточнена локализация атомов водорода в этих соединениях.
- Методом нейтронной стресс-дифрактометрии исследовано влияние технологии изготовления на распределение внутренних напряжений и текстуры в различных стальных пластинах, полученных с помощью аддитивных технологий.
- Методом нейтронной визуализации изучена внутренняя структура различных изделий, полученных с помощью аддитивных технологий, а также палеонтологических объектов и объектов культурного наследия.

Таблица 1.5. – Организации-пользователи нейтронного источника. Основная часть пучкового времени выделена научным организациям (35%), занимающимся прикладными и фундаментальными исследованиями и разработками

№	Название организации	Затрачено часов	Выполнено заявок
1	Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»	3 790	5
2	Объединенный институт ядерных исследований	1 504	2
3	Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» – ПИЯФ	551	4
4	Сколковский институт науки и технологий	792	2
5	Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН	168	1
6	Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»	274	1
7	Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»	432	1
8	Институт физики им Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН	828	1
9	Институт археологии Российской академии наук	156	1
10	Южно-Уральский государственный университет	240	1
11	Московский государственный университет	142	1
12	Новосибирский государственный университет	266	1
13	Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» – ВИАМ	317	1
14	Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»	112	1
15	Томский государственный политехнический университет	174	1
16	Южный федеральный университет	206	1

Подведомственные организации использовали пучковое время (18%) для выполнения комплексных исследований, направленных на решение актуальных научных задач.

Базовая организация – НИЦ «Курчатовский институт» использовала пучковое время (6%) для выполнения собственных научных программ, за исключением методических работ и работ на договорной основе.

Образовательные организации использовали пучковое время (41%) для учебных целей, позволив студентам и аспирантам проводить собственные эксперименты, углубляя знания и навыки в области физики и смежных дисциплин.

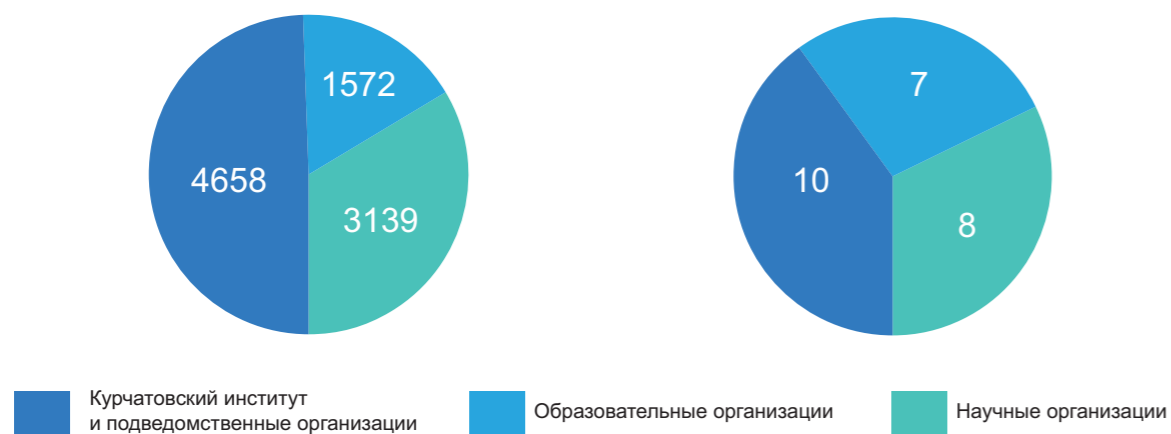
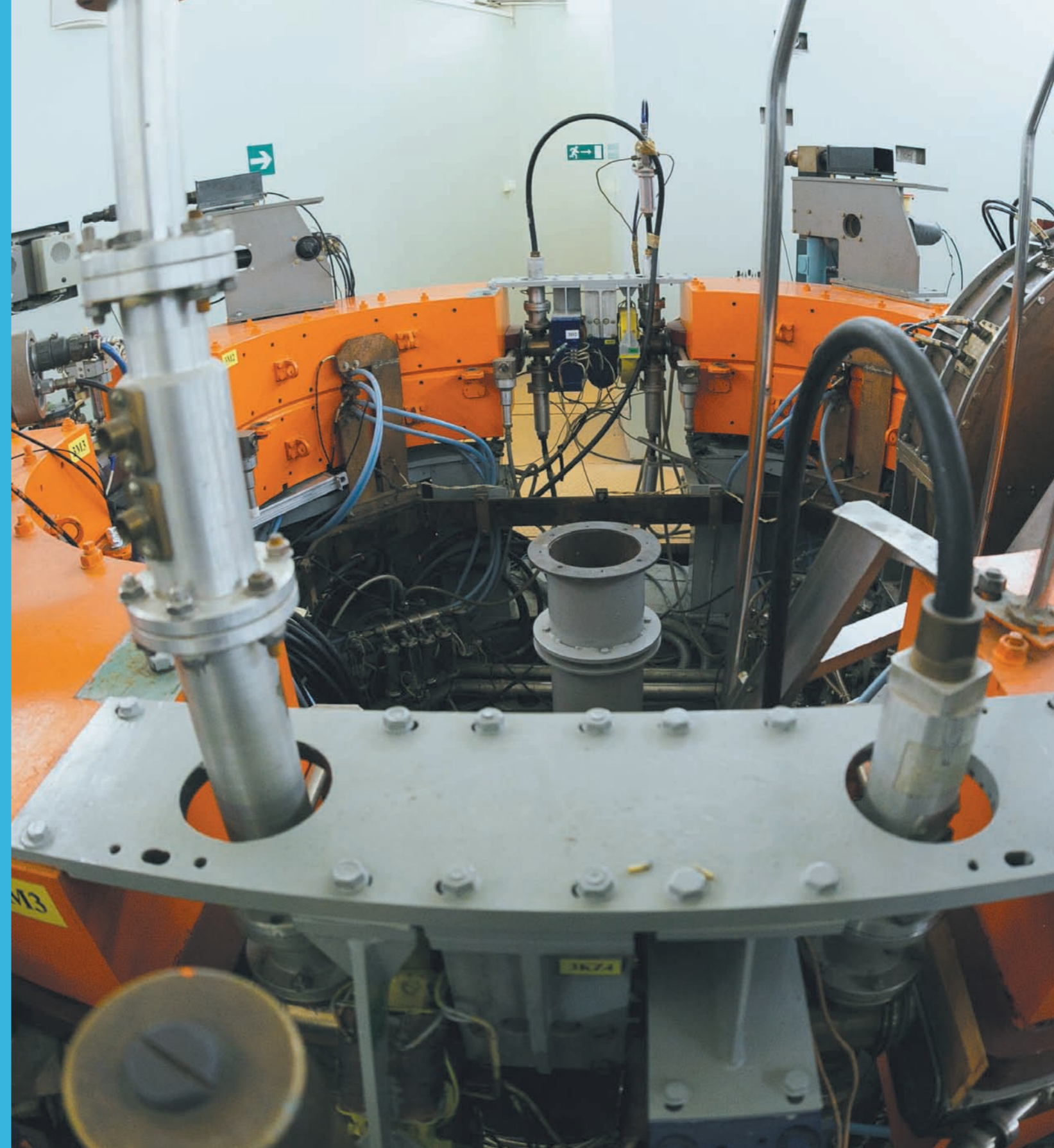


Рисунок 1.3. – Статистика работы НИК ИР-8. Слева - организации-пользователи нейтронного источника по количеству используемого времени (в часах), справа - по количеству заявок

Часть II

Научная деятельность комплекса



Глава 2 Избранные научные результаты

2.1. Материаловедение

Структурные и магнитные характеристики тонких пленок гематита

Исследования проведены в Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований

Гематит на сапфировых подложках обладает высокой частотой магнитного резонанса, что позволяет ему эффективно работать в терагерцовом диапазоне. Переход к тонким пленкам приводит к нетривиальному поведению магнитных свойств гематита. Изменение магнитных свойств тонких пленок гематита должно быть связано с изменением их реальной структуры.

Методами рентгеновской диагностики высокого разрешения и атомно-силовой микроскопии нами исследованы пленки гематита толщиной 5 нм (образец 1), 31 нм (образец 2), 90 нм (образец 3), 150 нм (образец 4) и 250 нм (образец 5), которые были получены методом магнетронного распыления на подложки Al_2O_3 с ориентацией (0001).

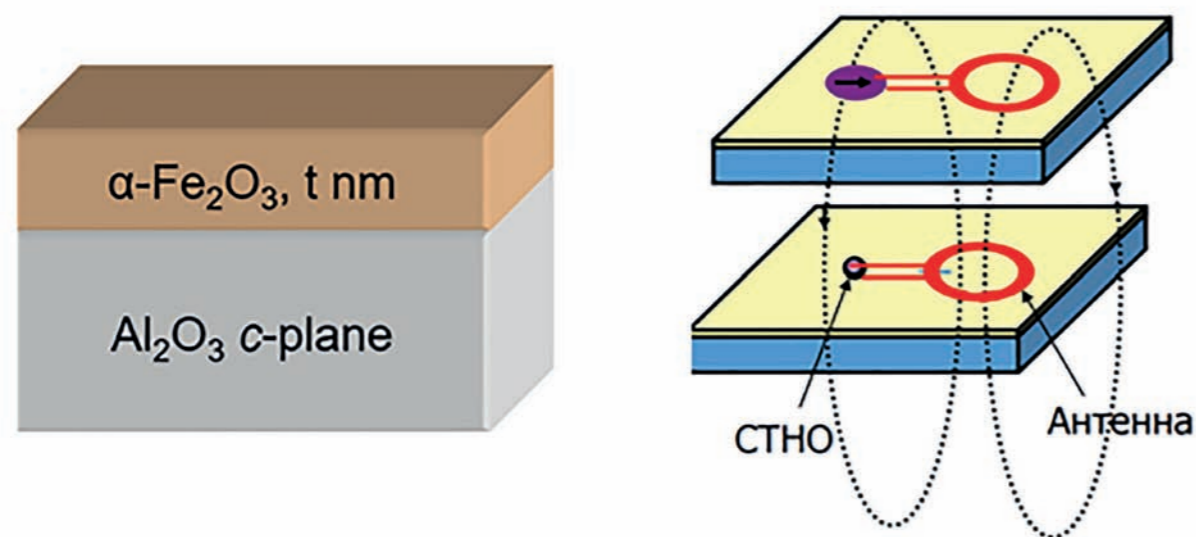


Рисунок 2.1. – Слева – тонкая пленка гематита на подложке сапфира, справа – спин-торковый наноосциллятор терагерцового диапазона

Рентгенодифракционные измерения показали, что с увеличением толщины пленки параметры кристаллической решетки Δa и Δb уменьшаются, однако, даже при толщине в 250 нм не достигают значений объемного материала. Для оценки напряженного состояния пленки была использована методика картирования узла обратного пространства. Суть подхода заключается в том, что для системы слой-подложка, кристаллические решетки которых имеют один и тот же набор элементов симметрии, картирование узла с координатами qx , отличным от 0, позволяет напрямую дать информацию о релаксированности слоя.

Кристаллическая решетка исследуемых пленок гематита имеет ту же пространственную группу, что и решетка сапфира. На рисунке 2.2. представлено увеличенное изображение обратного пространства вблизи узла $(01\bar{1}10)$. Красная прямая на рисунке соединяет узлы $(01\bar{1}10)$ и (0000) .

Из полученных данных видно, что узел $(01\bar{1}10)$ гематита для образца с толщиной 90 нм лежит точно на прямой, соединяющей узел (0000) и $(01\bar{1}10)$ сапфира. Можно сделать вывод, что эта пленка полностью релаксирована. Для остальных образцов наблюдается незначительное отклонение положения указанного узла относительно представленной прямой. С использованием процедуры двумерного определения центра масс было получено, что кристаллические решетки пленки гематита образцов 2 и 4 испытывают напряжение, в то время как образец 3 менее напряжен. Ввиду малой интенсивности дифракционного отражения от образца 1 был выбран узел $(30\bar{3}0)$ и измерения велись в *in-plane*-геометрии. Из полученной карты распределения интенсивности видно, что узлы $(30\bar{3}0)$ сапфира и гематита совпадают по положению qx , что означает, что пленка гематита с толщиной 5 нм полностью релаксирована.

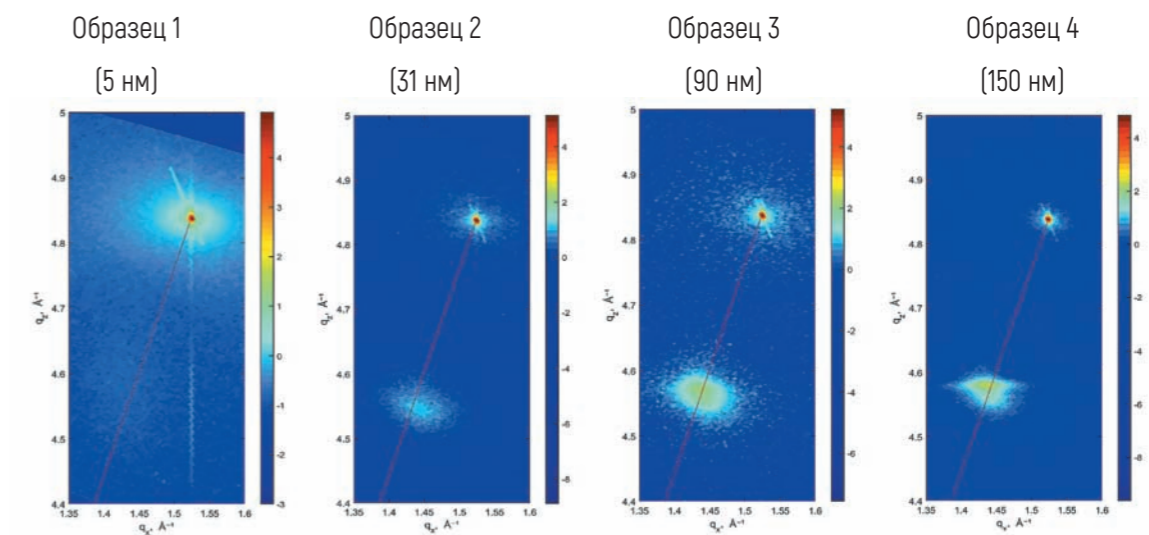


Рисунок 2.2. – Фрагмент обратного пространства вблизи узла $(01\bar{1}10)$ для исследуемых пленок гематита. Красная прямая соединяет узел (0000) и $(01\bar{1}10)$ сапфира

Таким образом, анализ распределения интенсивности дифракционного отражения в окрестностях указанных узлов позволили сделать вывод о состоянии пленок. Установлено, что кристаллические решетки тонких пленок гематита в образцах 2 и 4 испытывают механические напряжения, а образцы 1 и 3 релаксированы. Вызывает некоторое удивление, что пленка толщиной 5 нм релаксирована, а более толстая пленка напряжена. Такое поведение ультратонкой пленки гематита может быть связано с ее островковым, а не послойным ростом.

Рентгенодифракционные выводы подтверждаются данными атомно-силовой микроскопии (АСМ). По данным АСМ вся пленка 5 нм представляет собой разбросанные по поверхности сапфира «островки», иначе говоря, кристаллиты. На поверхности образца 2 видны незначительные вкрапления островков и происходит зарастивание пространства между островками за счет смены механизма роста пленки. Для образца 3 встречаются участки с гладкой поверхностью и участки с ярко-выраженным рельефом. Согласно дифракционным данным, пленка гематита в образце 3, вероятно, релаксирована. Релаксация напряжений может сопровождаться локальным разрывом пленки, который проявляется в виде выраженных образований на поверхности пленки. Образец 4 обладает гладкой поверхностью с незначительными

вкраплениями, что может свидетельствовать о зарождении дефектов, образованных при релаксации пленки меньшей толщины. Практически вся поверхность образца 5 представляет собой плотно расположенные островки со средним размером ~20 нм.

В то же время кривые намагниченности (рисунок 2.3) демонстрируют резкий нелинейный рост намагниченности с увеличением напряженности магнитного поля и узкие петли гистерезиса в слабых магнитных полях, а также линейный рост намагниченности в сильных магнитных полях. В частично или полностью напряженных пленках толщиной 90 нм и 150 нм магнитный момент перпендикулярен плоскости образца. Для полностью релаксированной пленки толщиной 250 нм магнитный момент составляет некий угол с поверхностью. $M(H)$ полностью релаксированной пленки толщиной 250 нм характеризуется большой коэрцитивной силой – причина: размерный эффект кристаллитов.

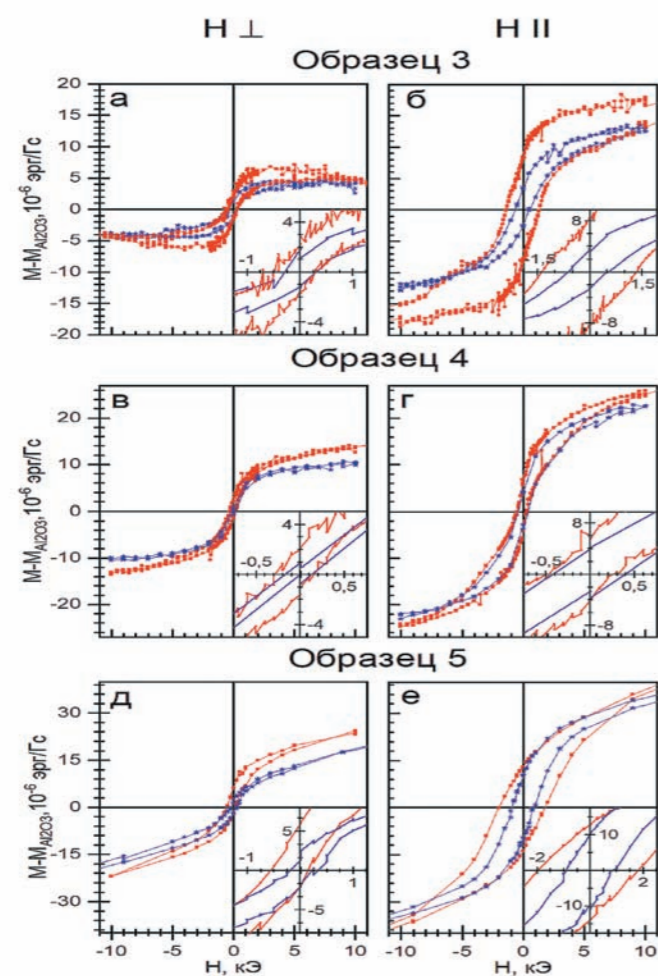


Рисунок 2.3. – Петли гистерезиса для образцов 3, 4 и 5, измеренные для магнитного поля, приложенного нормально (а, в, д) и параллельно (б, г, е) к плоскости образца при температурах 2 К (красные точки) и 300 К (синие точки). На вставках показаны центральные части в увеличенном масштабе

В напряженных пленках гематита наблюдается одноосное магнитное упорядочение, которое может привести к возникновению ферромагнитного резонанса в терагерцовом диапазоне и возможности создания спин-торкового осциллятора.

С учетом структурных данных, образец 4 можно охарактеризовать как частично релаксированную пленку, в то время как структурные исследования образца 3 свидетельствуют о том, что пленка находится

в более напряженном состоянии. Рентгенодифракционные исследования образцов 3 и 4 показывают, что пленки гематита являются однофазными. Известно появление модулированной магнитной структуры в кристаллах чистого гематита при наличии внутренних напряжений, возникающих в процессе роста кристалла. В напряженных тонких пленках можно наблюдать аналогичную структуру, которая проявляется в виде сужения петли гистерезиса в низких магнитных полях.

Таким образом, для исследования тонких пленок гематита, являющихся перспективным материалом антиферромагнитной спинтроники и магнитооптики, разработаны экспериментальные подходы, позволяющие проводить структурные исследования и получать информацию о реальной структуре планарных систем с тонкими и ультратонкими слоями и определять параметры структуры, оказывающее существенное влияние на их функциональные свойства. Продemonстрировано влияние напряженных и релаксированных пленок гематита на их магнитные и магнитооптические свойства. Показано, что в напряженных пленках гематита наблюдается одноосное магнитное упорядочение, которое может привести к возникновению ферромагнитного резонанса в терагерцовом диапазоне. Полученные результаты позволят проводить направленный дизайн структур для создания излучателей терагерцового диапазона.

Развитие методики определения параметра решётки и ориентационных соотношений наноразмерных плёнок YFeO_3

Исследования проведены в Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований

Известно, что особенности кристаллической структуры тонких плёнок существенно отличаются от таковых для объёмных материалов. Ориентационные соотношения, то есть углы и направления кристаллической решетки пленки относительно подложки, являются чрезвычайно важными для потенциального применения тонких плёнок. Контроль этих соотношений позволяет создавать материалы с заданными свойствами, что важно для развития нанотехнологий и материаловедения в целом. Поскольку магнитные и сегнетоэлектрические свойства YFeO_3 сильно анизотропны и наблюдаются в определенных направлениях, называемых оптическими осями кристалла, то необходимо правильно сориентировать кристаллографические направления пленки относительно подложки.

Большинство рентгеновских методов в случае эпитаксиальных тонкопленочных систем требуют использования синхротронного излучения, а широко используемые методы порошковой дифракции и вовсе неприменимы для такого рода объектов.

В настоящей работе был предложен алгоритм определения параметров кристаллической решетки тонких плёнок и ориентационных соотношений с использованием лабораторного рентгеновского дифрактометра и построения стереографических проекций. В качестве примера на рисунке 2.4 представлена стереографическая проекция пленки YFeO_3 толщиной 53 нм и ориентационные соотношения в той же пленке, сформированной на $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

ются обработкой экспериментальных данных, полученных для наноразмерных плёнок YFeO_3 на подложках $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Точное определение постоянных решетки и углов возможно путем объединения результатов рентгеновских измерений, выполненных в in-plane и out-of plane геометриях. Ошибки определения постоянных решетки и углов не превышают 0,017 нм и 0,17 градусов соответственно. Показано, что с уменьшением толщины плёнок их параметры всё более отличаются от параметров кристаллической решетки объёмного материала, что позволяет предположить возникновение сегнетоэлектрического эффекта в тонкопленочных системах. Предложенный способ измерений на стандартных рентгеновских установках может быть применён к широкому спектру материалов подложек и плёнок.

I. Subbotin, E. Pashaev, S. Dubinin et al. Orientational and crystallographic relationships in thin films of yttrium orthoferrite on sapphire substrates // Acta Crystallographica B. – 2024. – V. 80. – P. 340.

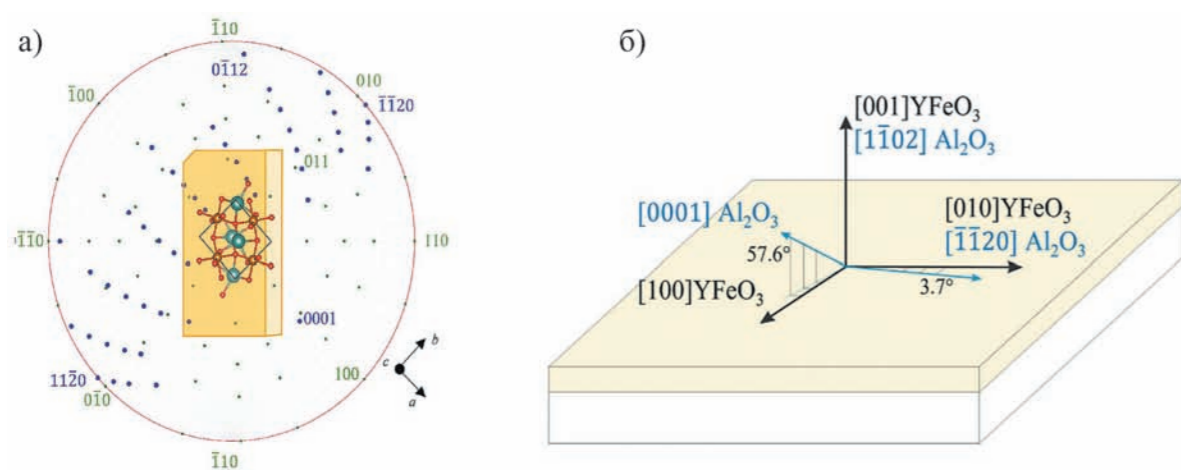


Рисунок 2.4. – а) стереографическая проекция пленки YFeO_3 толщиной 53 нм. В центре размещен исследуемый образец; б) ориентационные соотношения в той же пленке YFeO_3 на $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$

Построение стереографических проекций позволило определить ориентационные соотношения в тонких пленках YFeO_3 и правильно сориентировать оптическую ось кристалла. Результаты иллюстриру-

Локальная структура золотоносного арсенопирита

Исследования проведены совместно с Институтом геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН (ИГЕМ РАН)

Арсенопирит ($\text{FeAs}_{1-x}\text{S}_{1-x}$) является наиболее распространенным минералом, содержащим мышьяк, и основным промышленным источником этого элемента. Помимо этого, присутствие арсенопирита является показателем золотоносности месторождений. Природные минералы FeAsS могут содержать примеси золота и металлов платиновой группы в широком диапазоне значений концентраций (до 100 ppm) в виде твердого раствора, при этом, достоверно не известно, от чего зависит максимальное содержание золота в арсенопирите.

В данной работе проведено исследование природных образцов гидротермальной минерализации в месторождениях Олимпиада (Красноярский край) (образец 1) и Благодатное (Красноярский край) (образец 35), где производится около 40 т золота ежегодно. В образце 1 низкое содержание золота – 2 ppm, а в образце 35–10 ppm золота. В настоящей работе использовался метод EXAFS (протяженная структура рентгеновского спектра поглощения) для установления корреляции между концентрацией золота и атомарной структурой арсенопирита. Эксперименты по регистрации экспериментальных спектров выполнены на станции СТМ синхротрона «КИСИ-Курчатов». Спектры измерены около краев поглощения мышьяка и железа. Для извлечения более полной структурной информации из экспериментальных спектров EXAFS использовался метод эволюционной оптимизации предполагаемой структуры, реализованный в программе EvAX.

На рисунке 2.5 показаны радиальные функции распределения атомов для пар As-Fe, As-As, As-S и Fe-S, полученные в результате оптимизации исходной структуры арсенопирита для наилучшего совпадения экспериментального и расчетного спектров. Следует отметить, что в структуре FeAsS атом железа находится в октаэдре из 3 атомов серы и 3 атомов мышьяка, а атом мышьяка расположен в треугольной пирамиде из 3 атомов железа и одной серы. Форма и положение пиков радиальной функции распределения атомов до 2,5 Å практически полностью совпадают, т.к. определяются, в основном, ионными радиусами атомов в кристаллической решетке. Т.е. ближний порядок в кристаллической структуре не претерпевает изменений. Основные отличия наблюдаются в более дальних координационных сферах: происходит увеличение радиуса второй координационной сферы железа относительно мышьяка (рисунок 2.5, As-Fe) и аналогичное смещение пика As-As при 3,2 Å в сторону больших расстояний. Такое изменение радиальных функций распределения может происходить при перестраивании кристаллической решетки из-за наличия вакансий в позиции мышьяка или замещении серы на атом мышьяка.

Вхождение атомов золота в структуру арсенопирита на позицию железа может сопровождаться обогащением структуры мышьяком. Дело в том, что абсолютное значение эффективного заряда (по Бейдеру) мышьяка существенно меньше, чем у серы. Поэтому при внедрении золота, формальный заряд которого +1, на место железа с формальным зарядом +2 в кристаллическую

структуру FeAsS для сохранения баланса зарядов замена серы на мышьяк является энергетически предпочтительной, что и подтверждается структурными данными, полученными методом EXAFS.

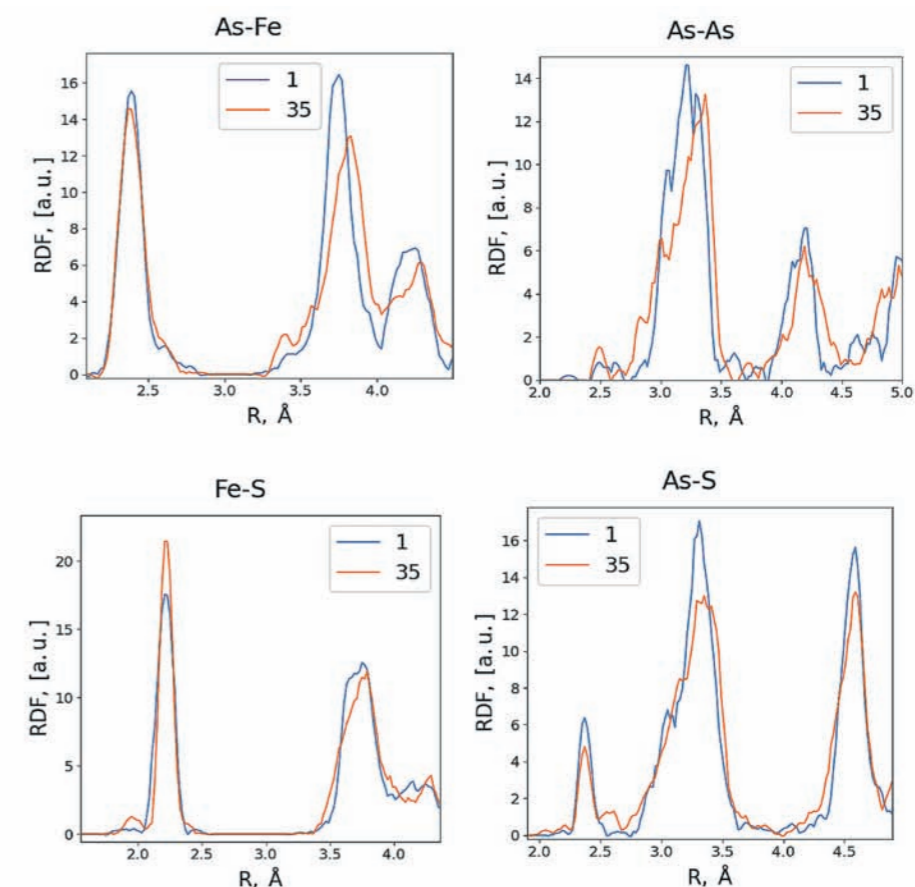


Рисунок 2.5. – Радиальные функции распределения атомов для пар атомов: As-Fe, As-As, Fe-S и As-S

Наличие значительного количества дефектов кристаллической структуры в виде замещения атомов серы на мышьяк способствует замещению атомов железа на однозарядные ионы, например, золото. Определение деформаций кристаллической решетки в присутствии примесных атомов металлов платиновой группы позволит повысить степень их извлекаемости из минерального сырья и таким образом увеличить их добычу.

Нейтронные томографические исследования объектов аддитивных производств из функционально-градиентных материалов

Исследования проведены совместно со Сколковским институтом науки и технологий (Сколтех)

В настоящее время аддитивные технологии являются одним из наиболее динамично развивающихся направлений «цифрового» производства. Они дополняют традиционные методы, основанные на удалении первичного материала (фрезерование, точение, строгание, шлифование). Производство изделий методом аддитивных технологий является трудоемким и дорогостоящим, поэтому оно оправдано только для таких деталей, при производстве которых невозможно использовать традиционные методы. Одной из проблем данной технологии является высокий локальный нагрев в месте печати, что может привести к появлению областей с преимущественной ориентацией зерен. Наличие таких областей может привести к ухудшению механических свойств готового изделия.

Наиболее актуальным и перспективным направлением является исследование изделий аддитивных производств из функционально-градиентных материалов, полученных методом прямого лазерного выращивания. В данной работе исследовались образцы системы аустенитная сталь (316L) – алюминиевая бронза (БрАЖ9,5-1) и изготовленные из чистой аустенитной стали (316L). Градиентный переход аустенитная сталь – алюминиевая бронза позволяет достичь высоких механических свойств с одной стороны изделия (аустенитная сталь) и высокой теплопроводности с другой (алюминиевая бронза). Изготовление такого рода изделий является востребованной задачей в аэрокосмической отрасли.



Рисунок 2.6. – Образец из аустенитной стали (слева) образец из функционально-градиентного материала (справа), полученные методом прямого лазерного выращивания, стрелкой обозначено направление выращивания

На станции ДРАКОН реактора ИР-8 были проведены исследования двух образцов (рисунок 5) методом нейтронной томографии с использованием монохроматического и полихроматического нейтронного излучения. Образцы были изготовлены технологией прямого лазерного выращивания (ПЛВ). Образец А (рисунок 5, а) с размерами 61 × 20 × 6 мм изготовлен из стали 316L. Образец Б (рисунок 2.6, б) с размерами 63 × 20 × 6 мм имеет чередование зон стали 316L и алюминиевой бронзы, толщина зоны одного материала 20 мм. Толщина одного слоя при печати образцов составляла 250 мкм.

Для каждого образца получены 360 радиографических изображений на монохроматическом ($\lambda = 2,4 \text{ \AA}$) и полихроматическом пучке нейтронов при повороте от 0 до 180° с шагом 0,5°, время экспозиции – 160 с (монохроматический пучок) и 240 с (полихроматический пучок). На рисунке 2.7 показано сравнение томографических изображений образца А, полученных на монохроматическом (а, б) и полихроматическом (в, г) нейтронном пучке.

На изображениях в-г образец выглядит однородным, без каких-либо внутренних дефектов (при пространственном разрешении станции $\approx 200 \text{ мкм}$), но на изображениях а-б образец имеет неоднородную структуру. Это говорит о том, что в процессе производства изделия образуются области с преимущественной ориентацией зерен, которые хорошо видны при использовании монохроматического пучка нейтронов. Области имеют вытянутую форму и совпадают с направлением выращивания изделия.

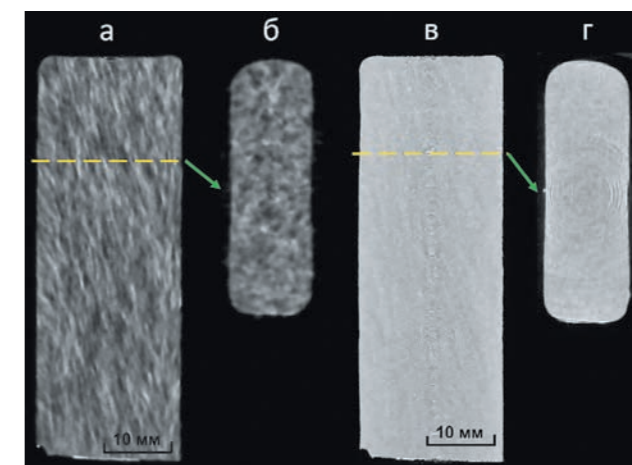


Рисунок 2.7.– Сравнение томографических изображений образца А, полученных на монохроматическом (а, б) и полихроматическом (в, г) нейтронном пучке в двух взаимно перпендикулярных проекциях, пунктирной линией показано направление среза

На изображениях в-г образец выглядит однородным, без каких-либо внутренних дефектов (при пространственном разрешении станции $\approx 200 \text{ мкм}$), но на изображениях а-б образец имеет неоднородную структуру. Это говорит о том, что в процессе производства изделия образуются области с преимущественной ориентацией зерен, которые хорошо видны при использовании монохроматического пучка нейтронов. Области имеют вытянутую форму и совпадают с направлением выращивания изделия.

На рисунке 2.8 (а, б) показаны томографические изображения образца Б, полученные на полихроматическом пучке нейтронов. На изображениях видны зоны разного состава. Внутренние дефекты не обнаружены (за исключением трещин между зонами на краю образца). Геометрия слоев печати не сохраняется, как снаружи, так и внутри. На рисунке 2.8 (в) показано томографическое изображение, полученное на монохроматическом нейтронном пучке. Видно, что в зонах, изготовленных из стали 316L (рисунок 2.8, г), также наблюдаются области с преимущественной ориентацией зерен, в зонах из алюминиевой бронзы, напротив, такого не наблюдается (рисунок 2.8, д). Области также имеют вытянутую форму и совпадают с направлением выращивания изделия.

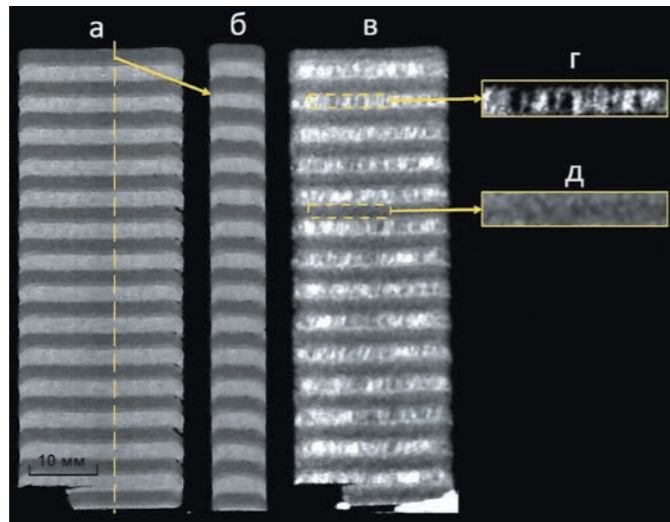


Рисунок 2.8. – Сравнение томографических изображений образца Б, полученных на полихроматическом нейтронном пучке в двух взаимно перпендикулярных проекциях (а, б) и монохроматическом (в), зона из аустенитной стали (г), зона из алюминиевой бронзы (д), пунктирной линией показано направление среза

Таким образом показано, что печать изделий методом прямого лазерного выращивания из стали марки 316L с текущими температурными и скоростными параметрами приводит к образованию областей с преимущественной ориентацией зерен, которые могут привести к ухудшению механических свойств готовой ответственной детали. В зонах из алюминиевой бронзы (БрАЖ9,5-1) образование таких областей не наблюдается. Полученные результаты позволят оптимизировать технологический процесс получения функционально-градиентных материалов на основе стали 316L. Кроме того, продемонстрировано, что нейтронные данные имеют первостепенное значение для диагностики функционально-градиентных материалов, разрабатываемых для применения в аэрокосмической отрасли.

Оптимизация нейтронных измерений остаточных напряжений в ферритных сталях большой толщины (≥ 80 мм)

Исследования проведены в Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований

Благодаря высокой проникающей способности нейтронов в большинстве металлов нейтронный метод активно используется для измерения напряжений в глубине металлических изделий. В эксперименте измеряются три главные компоненты тензора деформации: продольная, поперечная и нормальная. Длина пути нейтронов при измерении нормальной компоненты является наибольшей среди других компонент и определяет максимальную толщину образца, доступную для измерений. Следовательно, сократив длину пути нейтронов для данной компоненты, можно увеличить предельную толщину образца. Целью настоящей работы было исследовать возможность использования отражения $[220]$ вместо отражения $[112]$ для измерения нормальной компоненты в пластинах из ферритной стали большой толщины (≥ 80 мм). Отражение $[220]$ имеет меньшую интенсивность, но больший угол дифракции ($\theta^{220} = 50^\circ$), чем отражение $[112]$ ($\theta^{112} = 41.95^\circ$), что соответствует меньшей длине пути нейтронов. Главная идея заключалась в том, что, начиная с определённой толщины образца, интенсивность отражения $[220]$ станет выше, чем отражения $[112]$ из-за большего поглощения нейтронов при большей длине пути. Упругие константы для плоскостей $[110]$ и $[220]$ ферритной стали одинаковы, поэтому расчёт напряжений с использованием этих отражений является корректным. Эксперименты проводились на дифрактометре СТРЕСС, установленном на горизонтальном канале исследовательского реактора ИР-8 при мощности реактора 5 МВт. Для измерений по глубине использовался образец из ферритной стали в виде диска диаметром 130 мм и толщиной 40 мм. Дифракционные пики $[112]$ и $[220]$ ферритной стали измерялись в геометрии отражения в зависимости от глубины в центре диска с пробным объёмом 320 мм^3 ($4 \times 4 \times 20 \text{ мм}^3$) и 640 мм^3 ($4 \times 4 \times 40 \text{ мм}^3$).

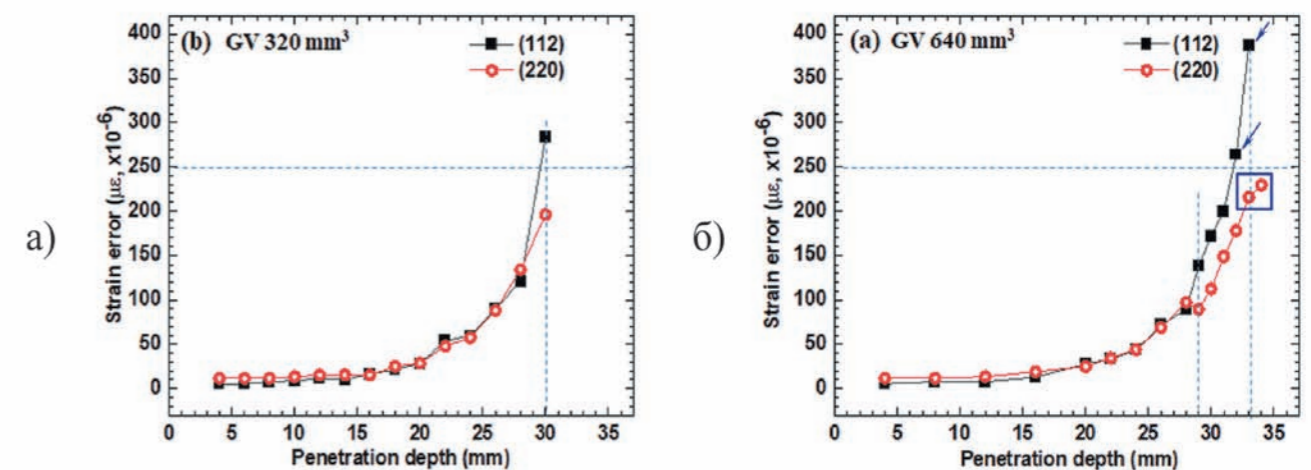


Рисунок 2.9. – Зависимости экспериментальных ошибок измерения деформаций $E_g(\epsilon)$ от глубины d для отражений $\alpha\text{-Fe}(112)$ и $\alpha\text{-Fe}(220)$ для пробных объёмов 320 мм^3 (рис. а) и 640 мм^3 (рис. б)

На рисунке 2.9 приведены зависимости экспериментальных ошибок измерения деформаций $E_g(\epsilon)$ от глубины d для отражений $\alpha\text{-Fe}(112)$ и $\alpha\text{-Fe}(220)$ для пробных объёмов 320 мм^3 (рис. а) и 640 мм^3 (рис. б).

На поверхности интегральная интенсивность отражения [112] примерно в 2,3 раза больше, чем отражения [220], поэтому ошибка для отражения [112] будет меньше. Результаты экспериментов показали, что использованная конфигурация позволяет уменьшить ошибку в измерении относительной деформации по сравнению со стандартной конфигурацией, использующей отражение [112]. Это связано с тем, что на одной и той же глубине длина пути нейтронов для отражения [220] меньше, чем для отражения [112] и разница растёт с увеличением глубины. Таким образом, предложенная конфигурация имеет преимущества при измерении стальных пластин толщиной более 60 мм. Использование оптимизированной конфигурации станции СТРЕСС позволит улучшить точность получаемых данных, которые могут быть использованы для оптимизации производственных процессов и термообработки, что позволит повысить качество конечной продукции.

Em V., Karpov I., Woo W., Mikula P. Neutron Diffraction Measurements of Residual Stresses for Ferritic Steel Specimens over 80 mm Thick // Metals. – 2024. – Vol. 14. – N. 6. – P. 638.

Нейтронное исследование структуры кристаллов суперпротоников

Исследования проведены совместно с Курчатовским комплексом кристаллографии и фотоники

Кристаллы-суперпротоники семейства с общей формулой $M_m H_n (XO_4)_{(m+n)/2} \times n H_2O$ ($M = K, Rb, Cs, NH_4$; $X = S, Se, P, As$) представляют интерес с точки зрения решения фундаментальных проблем – установления структурной обусловленности физических свойств и выявления влияния водородной подсистемы на физико-химические свойства материалов.

В кристаллах этого семейства при повышении температуры происходит фазовый переход, который сопровождается изменениями в системе водородных связей и приводит к появлению аномально высокой протонной проводимости, по величине близкой к проводимости расплавов этих солей.

Поскольку физико-химические свойства этих кристаллов и их изменения связаны с системами водородных связей, то особое внимание при исследовании кристаллической структуры таких материалов уделяется локализации протонов в структуре при различных температурах.

Одной из перспективных подгрупп, относящейся к общему семейству кристаллов-суперпротоников, как с точки зрения фундаментальных, так и прикладных исследований, являются кристаллы водно-солевой системы $CsH_2PO_4 - CsHSO_4 - H_2O$.

Исследование структуры кристаллов состава $Cs_3(HSO_4)_2(H_2PO_4)$ методом нейтронной дифракции представляет несомненный интерес для получения доказательств, что к аномальному увеличению проводимости приводит именно фазовый переход, а не процессы твердофазного распада.

Для получения уникальной информации о структуре данного соединения был проведен нейтронный дифракционный эксперимент на монокристалльном четырехкружном дифрактометре МОНД реактора ИР-8 с использованием монохроматического пучка нейтронов с длиной волны 1,06 Å, полученного от двойного монохроматора PG[002].

На рисунке 2.10 показана модель атомарной структуры кристалла $Cs_4(HSO_4)_3(H_2PO_4)$. В структуре кристаллов локализованы три атома водорода H1, H2, H3. Установлено, что атом H1 участвует в формировании между тетраэдрами PO_4 и SO_4 сильных водородных связей O1-H1-O3 (расстояние O-O равно 2.61(2) Å, угол <O-H-O - 170(2)°).

Атом H2 участвует в формировании водородных связей O2-H2-O2' (O-O - 2.52(1) Å, <O-H-O - 180°), которые связывают цепочки тетраэдров PO_4 и характеризуются симметричной одноминимумной потенциальной кривой. Позиция H2 имеет заселенность $q_{H2} = 0.75$ в пределах стандартных отклонений.

Атом H3 формирует слабую водородную связь O4-H3-O6' (расстояние O-O - 3.07(2) Å, угол <O-H-O - 152(6)°), соединяющую тетраэдры SO_4 , и занимает разупорядоченную позицию с заселенностью $q_{H3} = 1/2$. Расстояние между позициями H3 и H3' составляет 1.9(1) Å, и атомы водорода могут перемещаться между этими позициями, формируя связи O4-H3-O6' или O4-H3-O6'.

Нейтроннографические исследования позволили выполнить уточнение позиционных и анизотропных тепловых параметров атомов водорода и существенно повысить точность определения геометрии водородных связей в кристаллах $Cs_4(HSO_4)_3(H_2PO_4)$. Полученные структурные данные показывают, что в кристаллах-суперпротониках $Cs_4(HSO_4)_3(H_2PO_4)$ уже при комнатной температуре есть не полностью заселенные позиции H и разупорядочение водородных связей, что может говорить о наличии динамически разупорядоченной системы водородных связей в структуре кристалла-суперпротоника $Cs_3(HSO_4)_2(H_2PO_4)$. Полученная информация дает понимание процессов возникновения протонного транспорта в семействе кристаллов-суперпротоников, что позволит прогнозировать и конструировать материалы с заданными физико-химическими свойствами.

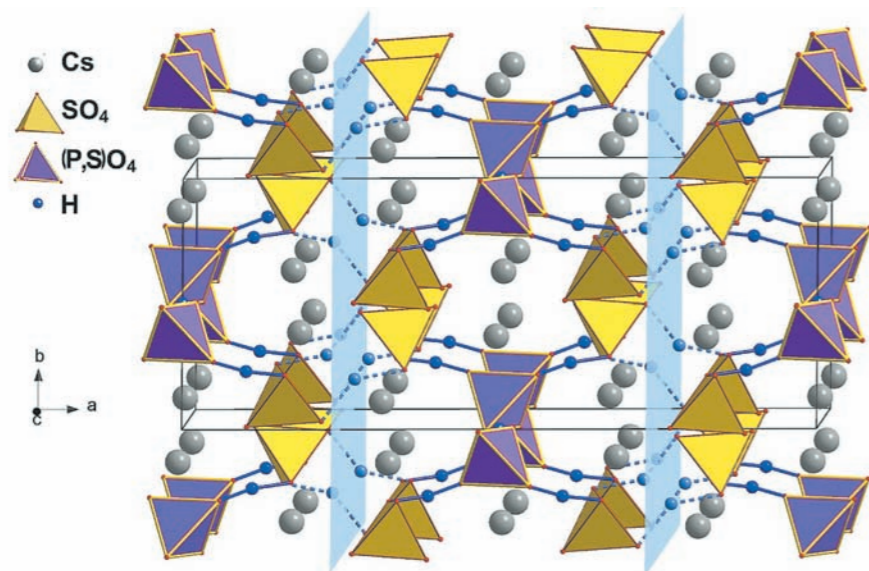


Рисунок 2.10. – Атомная структура кристалла $Cs_4(HSO_4)_3(H_2PO_4)$. Показаны тетраэдры SO_4 и $(P,S)O_4$, связанные водородными связями, а также плоскости $\{100\}$, пересекающие водородные связи O4-H3-O6

Makarova I. P., Isakova N. N., Kalyukanov A. I., Gainutdinov R. V., Tolstikhina A. L., Komornikov V. A. Features of the crystal structure and surface of superprotonic conductor caesium hydrogen sulfate phosphate // *Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials*. – 2024. – Vol. 80. – N. 3. – P. 201-207.

Кластеры графена в углероде: структурные особенности и магнитные свойства

Исследования проведены совместно с Южным федеральным университетом (ЮФУ)

Исследование ферромагнетизма двумерных нанографитовых и графеновых материалов является быстро развивающейся областью. В то время как чистый графит является диамагнитным, регулируемый магнетизм может быть вызван функционализацией, легированием или облучением углеродных наноструктур. Недавние экспериментальные и теоретические исследования, наряду с комплексными обзорами, продемонстрировали, что электронная структура углерода может приводить к ферромагнитным корреляциям, которые сохраняются даже при повышенных температурах.

Графен по своей сути немагнитен, поскольку все валентные электроны в шестиатомных кольцах углерода идеально спарены, образуя σ - и π -связи. Все усилия по намагничиванию графена направлены на разрыв симметричных связей, высвобождение неспаренных электронов и создание чистых спинов. Например, было высказано предположение, что магнитные свойства в углеродных наноструктурах могут возникать из-за зигзагообразных краев углеродных листов, где π -электроны становятся локализованными и сильно спин-поляризованными. Кроме того, магнитные моменты могут быть вызваны различными дефектами, включая ад-атомы. Также считается, что химическое легирование инородных атомов играет решающую роль в механизме намагничивания. Магнитные моменты могут образовываться в чистых углеродных наноструктурах, когда sp^2 - и sp^3 -гибридизованные атомы углерода сосуществуют с различными валентностями.

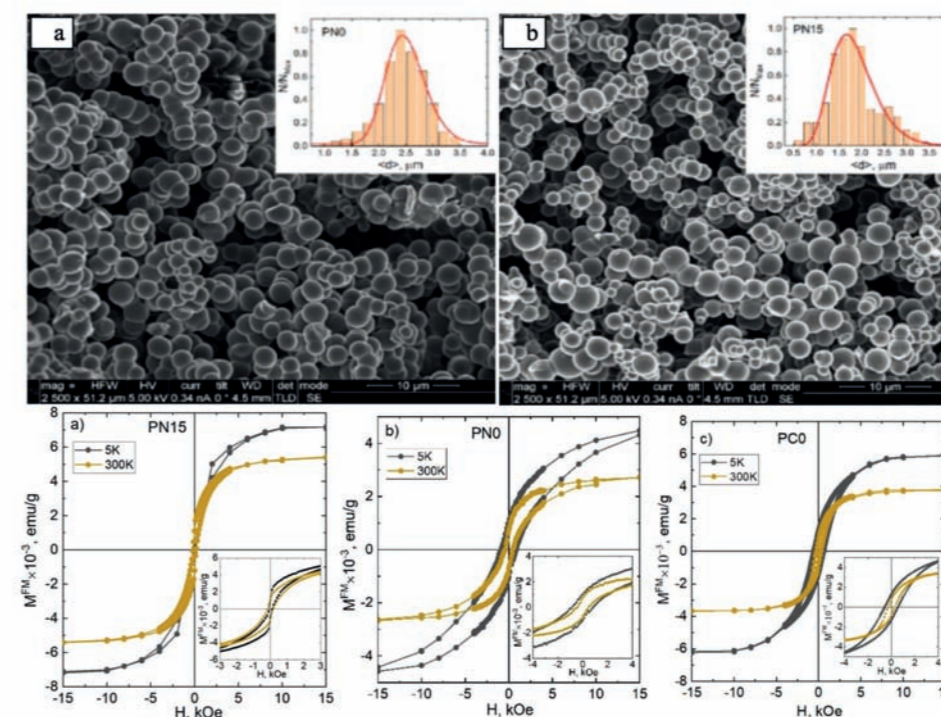


Рисунок 2.11. – СЭМ -изображения синтезированных образцов углеродных наносфер, легированных азотом (сверху) и зависимость MFМ от H (вставка - петля гистерезиса) образцов PN-15, PN-0 и PC-0 при температурах 5 и 300 К (снизу)

Легирование углеродных материалов (показанных на рисунке 2.11) азотом является эффективным фактором для управления электронными характеристиками полученных материалов, следовательно, влияя на их магнитные свойства. Манипулируя концентрацией азота, мы успешно изменяем отношение sp^3/sp^2 углерода в диапазоне от 1 до 2,7, а также отношение пиридинового азота к пиррольному в диапазоне от 0,6 до 1,3. Показано, что увеличение количества пиррольного азота приводит к росту отношения sp^3/sp^2 . Магнитные свойства материалов были измерены при двух различных температурах (5 К и 300 К) и во внешних магнитных полях до 50 кЭ.

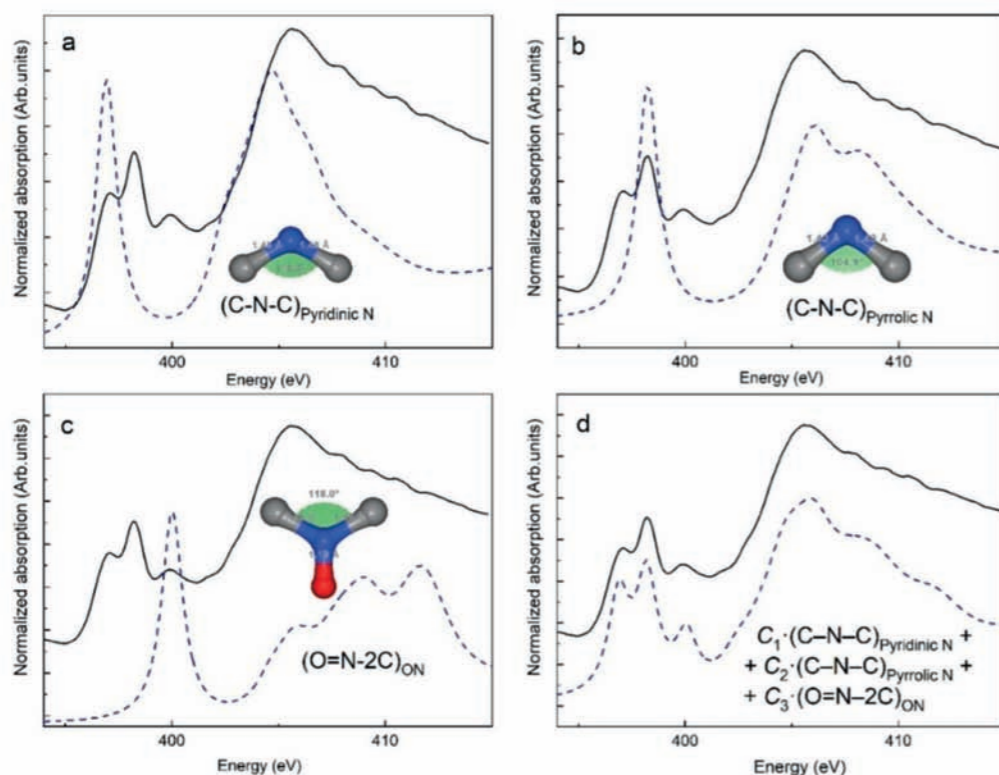


Рисунок 2.12. – Сравнение экспериментальных спектров N К-края поглощения (сплошные черные линии) в образце и теоретических спектров (штриховые синие линии) для различных типов азотных связей. (a) – атомной цепочки $(C-N-C)_{\text{пиридинового N}}$ с $R_{N-C} = 1,48 \text{ \AA}$, $\alpha_{C-N-C} \approx 118^\circ$, типичной для пиридинового N; (b) – атомной цепочки $(C-N-C)_{\text{пиррольного N}}$ с $R_{N-C} = 1,43 \text{ \AA}$, $\alpha_{C-N-C} \approx 105^\circ$, типичной для пиррольного N; (c) – атомной цепочки $(O=N-2C)_{\text{NO}}$ с $R_{N-O} = 1,18 \text{ \AA}$, $R_{N-C} = 1,48 \text{ \AA}$, $\alpha_{C-N-C} \approx 118^\circ$, типичной для окисленного N; (d) – сумма трех членов: [39%] C1 $(C-N-C)_{\text{пиридиновая N}}$ + [43%] C2 $(C-N-C)_{\text{пиррольная N}}$ + [18%] C3 $(O=N-2C)_{\text{ON}}$.

Подтверждено, что увеличение отношения sp^3/sp^2 приводит к увеличению намагниченности насыщения N-легированных углеродных наноструктур. Эта корреляция наблюдалась как при 300 К, так и при 5 К. Таким образом, мы обнаружили, что концентрация пиррольного азота является эффективным инструментом для настройки магнитных свойств углеродистых структур. Измерение и анализ спектров рентгеновского поглощения вблизи краев углерода и азота (рисунок 2.12) исследуемых углеродных структур позволило провести DFT моделирование, что было необходимо для понимания природы магнитных свойств материала.

Chumakov R.G. et al. Graphene clusters in carbon: Structural features and magnetic properties // Applied Surface Science. – 2025. – Т. 687. – P. 162284.

Ферромагнетизм при комнатной температуре в системе графен/SiC(0001), интеркалированной Fe и Co

Исследования проведены совместно с Санкт-Петербургским государственным университетом

Использование графена на подложках из карбида кремния (SiC) имеет существенные перспективы для применения в спинтронике и нанoeлектронике. Кроме того, включение магнитных металлов обеспечивает оптимальную основу для исследования фундаментальных физических явлений. Подход к разработке таких систем заключается в интеркаляции графена с магнитными металлами in-situ. При этом анализируется электронная структура и синтезируются магнитные свойства системы путем термического разложения поверхности 6H-SiC(0001) и последующей интеркаляции графена с атомами кобальта (Co) и железа (Fe), что схематически показано на рисунке 2.13.

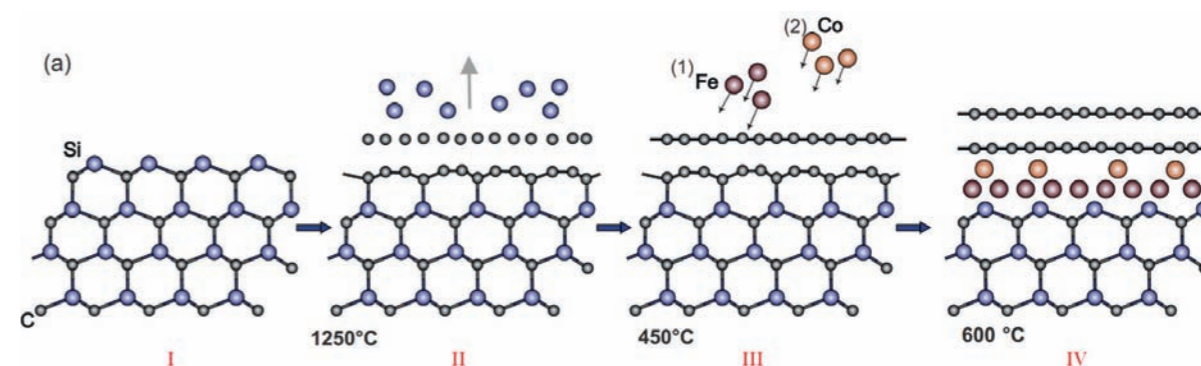


Рисунок 2.13. – Схематическое изображение процесса интеркаляции атомов Fe и Co в систему графен/SiC(0001)

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и дифракция медленных электронов были использованы для контроля процессов синтеза и интеркаляции металлов. Морфологические характеристики синтезированной системы изучаются с помощью атомно-силовой микроскопии. Данные, полученные в результате измерений магнитооптического эффекта Керра, показывают однородное ферромагнитное упорядочение созданной системы при комнатной температуре.

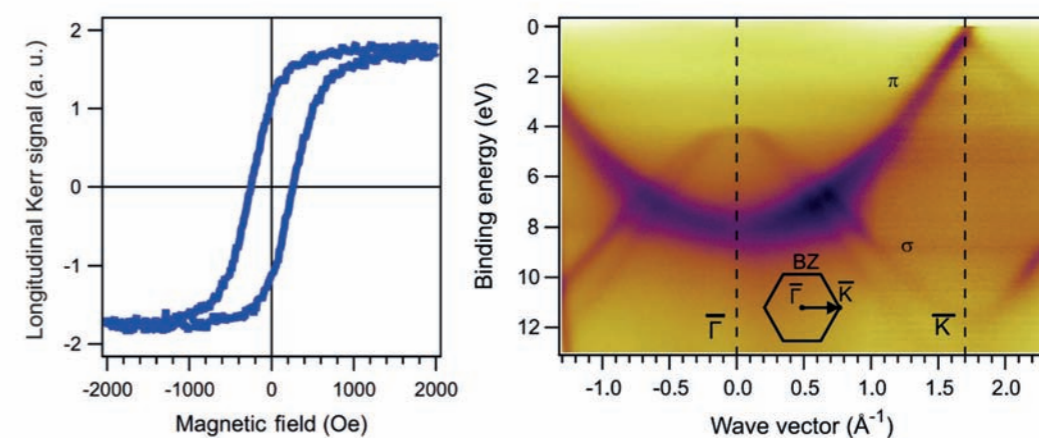


Рисунок 2.14. – Результаты измерений магнитооптического эффекта Керра при комнатной температуре (слева). Структура валентной зоны вдоль Г-К графена на SiC(0001), интеркалированного атомами Co и Fe, измеренная методом ARPES с излучением HeI α ($h\nu = 21,2 \text{ эВ}$) при температуре образца 30 К (справа)

Спектры фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES), показанные на рисунке 2.14 демонстрируют образование хорошо ориентированного двухслойного графена с характерной линейной дисперсией π -состояний вблизи уровня Ферми. Эти результаты предоставляют первый известный метод получения ферромагнитного упорядочения при комнатной температуре в графеновой системе на SiC посредством интеркаляции с потенциальными применениями в устройствах спинтроники и реализацией квантового аномального режима Холла при повышенных температурах.

Chumakov R.G. et al. Room temperature ferromagnetism in graphene/SiC (0001) system intercalated by Fe and Co // physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters. – 2024. – Т. 18. – №3. – P. 2300336.

Структура ионных каналов в перфторированных мембранах, изученная методами малоуглового рентгеновского рассеяния и мессбауэровской спектроскопии

Исследования проведены совместно с НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

Актуальная проблема водородной энергетики связана с необходимостью создания твердых полимерных электролитов, служащих ионообменными мембранами для транспорта протонов в топливных элементах. В настоящее время эти материалы основаны на перфторированных сополимерах Nafion® и Aquion®, которые обеспечивают необходимые функциональные характеристики мембран (протонная проводимость, прочность, механическая и термическая стабильность, низкий кроссовер топлива). Способы дальнейшего совершенствования этих материалов требуют детального анализа их сложной наноструктуры, которая формируется в результате сегрегации неполярных фрагментов цепей из ионных групп, образующих узкие поры и каналы для транспорта воды и протонов.

Для определения структуры и тонких особенностей молекулярного упорядочения в мембранах в работе использовался метод рентгеновского малоуглового рассеяния (SAXS), а также мессбауэровская спектроскопия (МС).

Перфторированный сополимер типа Nafion® был синтезирован путем сополимеризации в растворе тетрафторэтилена (TFE) с мономером FS-141 с эквивалентной массой $EW = 900$ г-экв/моль (масса фрагмента цепи на сульфоновую группу SO_3H). Сополимер, растворенный в диметилформамиде (ДМФА), наносили на стеклянную подложку. После формирования пленки из раствора путем удаления растворителя при нагревании ее переводили в форму $-SO_3H$ путем промывки в 15% азотной кислоте, превращая ее в протонпроводящую мембрану. Затем пленки (60 мкм) высушивали и отжигали при $100^\circ C$ для получения стабильной (равновесной) структуры.

Сухие мембранные пленки исследовались методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) на синхротронной станции БиоМУР. Результаты эксперимента показаны на рисунке 2.15.

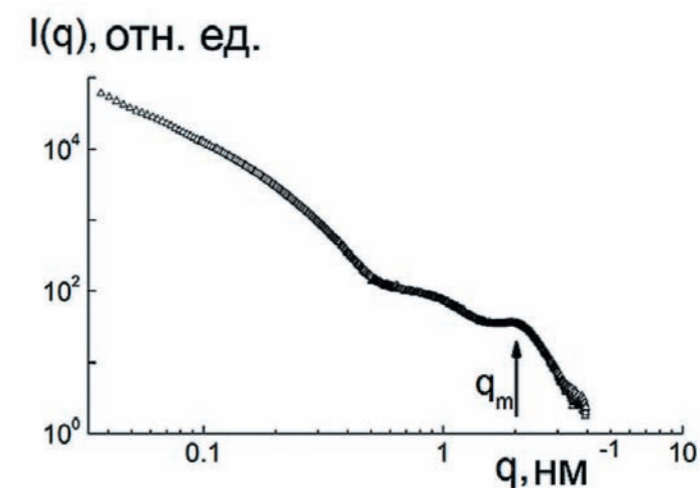


Рисунок 2.15. – Интенсивности SAXS $I(q)$ в зависимости от модуля вектора рассеяния для сухой пленки Nafion®. Указано положение пика иономера при q_m

Данные SAXS для сополимера типа Nafion® (рисунок 2.15) выявили наличие узких ионных каналов с поперечным радиусом инерции $R_g < 1$ нм, которые окружены оболочками скелетных цепей с частично кристаллическим порядком и локально упорядочены в наноразмерные пучки (домены). Действительно, интенсивности рассеяния $I(q)$ увеличились при $q \leq 0,1$ нм⁻¹, что показывает в мембране наличие полимерных доменов размером $\sim 10^1$ – 10^2 нм (рисунок 2.15). При большем q было обнаружено локальное упорядочение ионных каналов, упакованных в пучки с пространственным периодом расположения каналов $LP \sim 2\pi/qm$, соответствующим положению пика иономера $qm \sim 2$ нм⁻¹.

С учетом полученных результатов, а также данных мессбауэровской спектроскопии, был сделан вывод об образовании в мембранах структуры, представленной на рисунке 2.16.

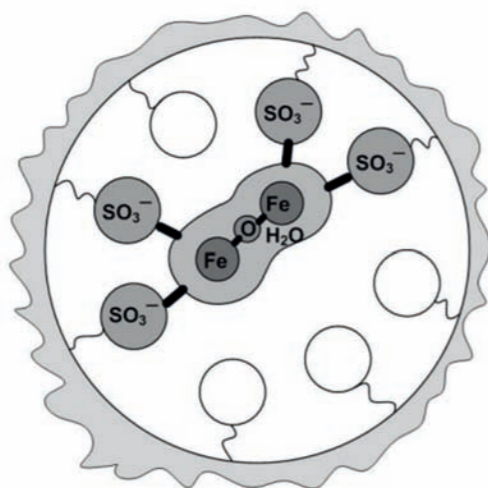


Рисунок 2.16. – Итоговая структура - гидратированный димер Fe^{3+} , связанный с группами сульфоновой кислоты в ионном канале мембраны

Обнаруженные структуры каналов основаны на расположении сульфоновых групп, покрывающих внутреннюю поверхность каналов, исследованных с помощью SAXS и МС с использованием ионов железа в качестве крошечных локальных зондов, создающих димеры, связанные с группами. Это также привело к изменению электрических свойств сополимера, оптическая энергетическая щель которого уменьшилась из-за модификации материала ионами железа.

Полученные результаты выявили исключительные возможности применения дополнительных методов исследования структурных, оптических и электрических свойств полиэлектrolитов, востребованных для различных приложений, включая водородную энергетику и ядерные технологии, нуждающиеся в эффективных ионообменных материалах для создания топливных элементов.

Peters G.S. et al. Ionic channel structure in perfluorinated membranes studied by small angle X-ray scattering, optical and Mossbauer spectroscopy // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. – 2025. – Т. 15. – №5. – P. 716-725.

Исследование новых анодных материалов для калий-ионных аккумуляторов на основе дефектных пироксенов методом *operando* XAS

Исследования проведены совместно со Сколковским институтом науки и технологий (Сколтех)

Калий-ионные аккумуляторы (КИА) – одна из главных альтернатив литий-ионным аккумуляторам благодаря стоимости и распространенности калиевых прекурсоров, а также соизмеримым электрохимическим характеристикам. Дефектные пироксены (ДП) $KM_xW_{2-x}O_6$ могут рассматриваться в качестве потенциальных анодов для КИА благодаря структурной гибкости K_2O' подрешетки, обуславливающей высокую подвижность K^+ . По результатам циклической вольтамперометрии и гальваностатического циклирования было показано, что соединения $KM_xW_{2-x}O_6$ обладают окислительно-восстановительной активностью в области низких потенциалов (~ 1.1 – 1.4 В против K^+/K). Кроме того, $KNbWO_6$ продемонстрировал крайне низкие потери емкости в длительных гальваностатических испытаниях.

Нерешенной задачей в развитии материалов на основе ДП для систем запасаения энергии является понимание механизма электрохимической деинтеркаляции–интеркаляции щелочного катиона в структуру. Исходя из близких значений формальных потенциалов для всех $KM_xW_{2-x}O_6$, было сделано предположение о значительном вкладе пары $W^{6+}/W^{(6-x)+}$ в конечную O–В активность дефектных пироксенов, однако оценить вклад других переходных элементов (Nb, Ti, Ta, Cr), которые делят с вольфрамом одну кристаллографическую позицию, в лабораторных условиях не представляется возможным.

Для исследования процесса интеркаляции K^+ в состав $KNbWO_6$ локальная структура ниобия и вольфрама была исследована методом EXAFS на K-крае Nb и L³-крае W в режиме *operando* на станции СТМ синхротрона «КИСИ-Курчатов» в ходе гальваностатического циклирования ячейки с $KNbWO_6/C$ в качестве рабочего электрода и металлического калия в качестве противоэлектрода и референсного электрода.

Наиболее удачной моделью для описания координационного окружения W представляется одна координационная сфера, заселенная атомами O. В случае атомов Nb наиболее удачной моделью представляется двухсферная, что может соответствовать либо искаженному октаэдрическому окружению, либо двум типам окружения Nb в составе одной фазы. Результаты моделирования EXAFS представлены на рисунке 2.17. Видны значительные изменения межатомных расстояний W–O и Nb–O, обусловленные изменениями потенциала.

Также показано, что в результате заряда ячейки координационное число (КЧ) W обратимо уменьшается с 6 до 4, а КЧ Nb остается постоянным. Данный вывод согласуется с предположением о том, что окислительно-восстановительная активность ДП обусловлена изменениями зарядового состояния вольфрама, но требует дополнительных исследований методом рентгеновской дифракции в режиме *operando* для объяснения существования двух различных межатомных расстояний Nb–O. Раздвоение первой координационной сферы Nb может быть связано, например, с частичным переходом $K_{1+x}NbWO_6$ из структурной группы Fd-3m в F-43m, возможность которого показана в литературе, либо с полной трансформацией ДП

в иную структуру – с искаженным октаэдрическим окружением Nb или двумя типами окружения Nb в составе одной фазы.

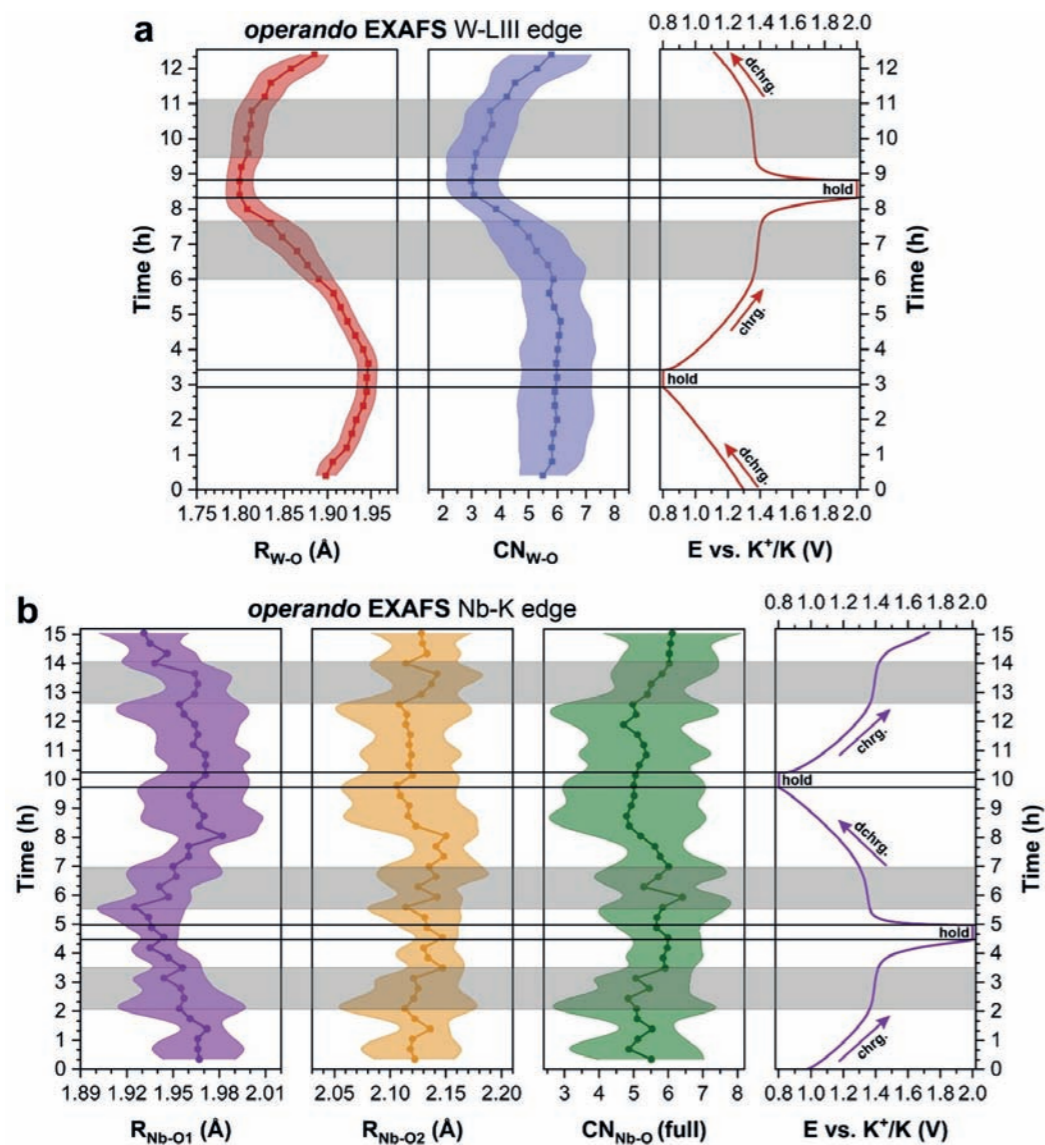


Рисунок 2.17. – Межатомные расстояния и координационные числа по данным EXAFS, совмещённые с соответствующими гальваностатическими кривыми, для (А) W-LIII и (В) Nb-K краёв. Заливкой указаны пределы погрешности в определении параметра

Полученные данные об изменении локальной структуры ниобия и вольфрама в KNbWO_6 в ходе гальваностатического циклирования необходимы для объяснения механизма деинтеркаляции-интеркаляции катиона Nb в структуру вольфрамата калия.

Объяснение механизма позволит создать новые промышленно значимые материалы для катодов калий-ионных аккумуляторов на основе дефектных пироксенов. С применением этих материалов в дальнейшем могут быть созданы системы запасания энергии с более низкой стоимостью по сравнению с существующими аналогами.

Структурные параметры термообработанных крейзованных образцов аморфных стеклообразных и частично-кристаллических полимеров в жидких средах

Исследования проведены совместно с Московским Государственным университетом им. М.В. Ломоносова

Известно, что фундаментальные характеристики вещества (температуры фазовых переходов, энтальпия плавления и кристаллизации) могут претерпевать серьезные изменения при уменьшении протяженности фаз до наноразмеров. Увеличение соотношения поверхности к объему при кристаллизации полимеров в нанослоях, тонких пленках, эмульсиях, блоксополимерах, теплотах, трековых мембранах и т.д. может сопровождаться изменением механизма зародышеобразования, размеров и морфологии кристаллитов, а также возникновением ориентации макромолекул. Помимо фундаментальных аспектов исследование кристаллизации полимеров в «затрудненных» условиях имеет важное прикладное значение, так как многие свойства полимеров, полимерных композитов и мембран, например, способность к набуханию, газо- и паропроницаемость, ионная проводимость, смачиваемость и даже антибактериальные свойства, определяются их фазовым состоянием.

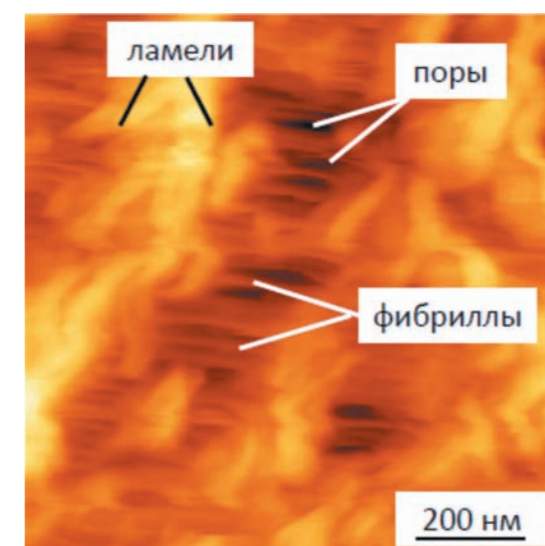


Рисунок 2.18. – АСМ изображение деформированного на 200% по механизму крейзинга ПЭВП, ось экструзии и растяжения горизонтальны

Деформирование полиэтилена высокой плотности (ПЭВП) в физически активных жидких средах (ФАЖС) происходит по механизму крейзинга и сопровождается формированием объемной пористости до 60 об%. На рисунке 2.18 приведено изображение ПЭВП после растяжения в ФАЖС, полученное с помощью атомно-силовой микроскопии. Исходные пленки ПЭВП имеют слоистую структуру, так называемую row-structure, с ламелями преимущественно ориентированными в перпендикулярном оси экструзии направлении. После деформации по механизму крейзинга на АСМ изображениях ПЭВП видны фибриллы, направленные вдоль оси вытяжки, и щелевидные поры между ними. По профилям сечений, построенным вдоль оси

растяжения, измерена величина большого периода, которая составила 195 ± 72 нм для ПЭВП, деформированного на 200%. Средняя величина расстояния между вершинами фибрилл (параметр, характеризующий сумму ширины поры и диаметра фибриллы) составила 35 ± 8 нм. Таким образом, в процессе деформации ПЭВП по механизму крейзинга происходит формирование мезоразмерной пористой структуры.

В процессе крейзинга мезопористая структура ПЭВП заполняется жидкой средой, в качестве которой помимо традиционных органических растворителей можно использовать растворы низко- и высокомолекулярных соединений на основе ФАЖС. В данной работе выбор в качестве вводимого высокомолекулярного соединения поливинилового спирта (ПВС) позволил исследовать влияние нанограниченного 3D-пространства на кристаллизацию полимера. При удалении летучей ФАЖС в изометрических условиях формируется композит, в котором стенки пор ПЭВП (полимер-«хозяин») механически препятствуют агрегации введенного ПВС (полимер-«гость»), и «гость» оказывается диспергирован на наноразмерном уровне в матрице «хозяина», что подтверждено данными сканирующей электронной микроскопии с рентгено-спектральным микроанализом.

На рисунке 2.19 а представлены кривые WAXS рассеяния исходных полимеров ПЭВП (1), ПВС (2) и нанокompозита ПЭВП/ПВС (3). На кривой рассеяния ПЭВП и композита ПЭВП/ПВС наблюдаются хорошо выраженные рефлексы ПЭВП (110), (200), (210), (020) при $15,4$, $17,1$, $21,4$ и $25,7$, nm^{-1} . Однако нельзя исключить, что слабый пик при $13,9$ nm^{-1} можно отнести как к (010) моноклинной фазы ПЭВП, так и наиболее интенсивному (101) рефлексу ПВС. Степень кристалличности исходного ПЭВП по данным WAXS составила ~73%, степень кристалличности композита ~75%, что на 10% выше значений, полученных методом ДСК.

Предложенный подход дает возможность целенаправленно модифицировать и контролировать микроструктуру образца. Это позволяет влиять на разнообразные функциональные свойства, что может быть применимо для создания новых материалов для огромного числа прикладных задач. Полученные данные о структуре и степени кристалличности полимеров дают важную информацию для нужд современной биотехнологии и хирургии, поскольку описывают поведение материала, потенциально применимого для изготовления биоразлагаемых швов и штифтов, в условиях, имитирующих реальную среду внутри живого организма.

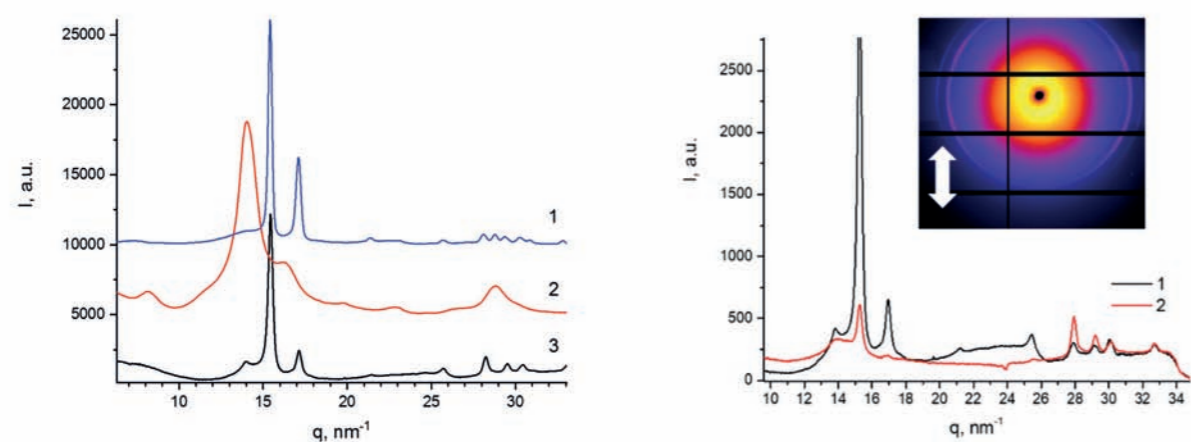


Рисунок 2.19. – (а) Рентгенограммы на больших углах 2θ для образцов ПЭВП (1), ПВС(2), нанокompозита ПЭВП/ПВС, полученного деформированием ПЭВП на 200% в растворе ПВС(3). (б) 2D дифрактограммы ПЭВП/ПВС в экваториальном (1) и меридиональном (2) направлениях, на вставке дифракционное изображение, направление растяжения указано стрелкой

На рисунке 2.19 б представлены измерения WAXS композита ПЭВП/ПВС в экваториальном (1) и меридиональном (2) направлениях, проведенные на станции БиоМУР синхротрона «КИСИ-Курчатов». Видно, что пики более интенсивны в экваториальном направлении сканирования, что позволяет сделать вывод о возникновении ориентации макромолекул ПЭВП вдоль оси растяжения при крейзинге.

Фазовые переходы в жаропрочных никелевых сплавах

Исследования проведены совместно с Российским технологическим университетом (РТУ МИРЭА)

Жаропрочные никелевые сплавы, легированные тугоплавкими металлами, применяются в качестве материалов лопаток и сопел газотурбинных двигателей. Производство таких сплавов до сих пор представляет определенные сложности. Основным способом производства лигатур, содержащих тугоплавкие металлы, является электродуговой переплав. Этот метод не позволяет получить сплав однородный по химическому и фазовому составу, а кроме того, сопряжен с потерями компонентов и значительными затратами энергии. Конкурентом традиционным методам получения лигатур выступает алкоксотехнология, которая позволяет получать лигатуры с заданным соотношением компонентов, высокой степенью однородности состава.

В рамках настоящей работы методом алкоксотехнологии были получены биметаллические алкоксиды с общей формулой $Ni_n M_m O_x (OR)_y$ ($M = Hf$; $R = CH_3, C_3H_7$) с различным соотношением компонентов, которые в дальнейшем выступают в качестве предшественников для получения лигатур. Для того чтобы установить фазовые составы и структуры прекурсоров (метилата гафния-никеля, изопропилата гафния-никеля) и отожжённых образцов, а также оптимизировать условия синтеза, были проведены исследования методом порошковой рентгеновской дифракции на станции Белок/РСА синхротрона «КИСИ-Курчатов».

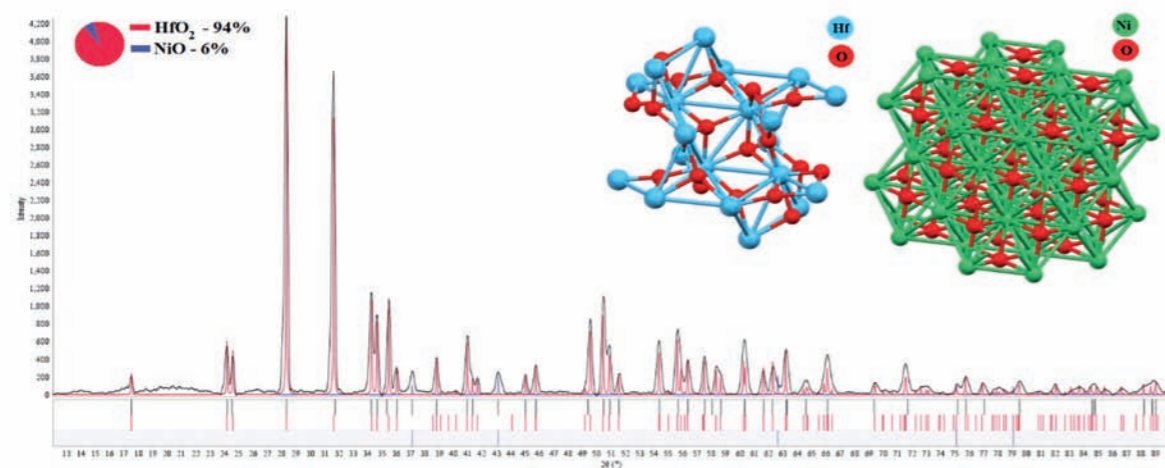


Рисунок 2.20. – Результаты рентгенофазового анализа оксидов HfO_2 , NiO , получившихся в процессе термического разложения $Ni_n Hf_m O_x (OC_3H_7)_y$ при $600^\circ C$

С помощью рентгенофазового анализа установлено, что если синтез предшественников осуществлялся с использованием ацетилацетоната никеля, то помимо метилата гафния-никеля или изопропилата гафния-никеля в растворе присутствовал непрореагировавший ацетилацетонат никеля. Соответственно, электрохимический синтез в гальваностатическом режиме (попеременное растворение металлов в соответствующем спирте) оказался более успешным в части получения однофазных продуктов. Более того

установлено, что при концентрации электропроводящей добавки (тетраэтиламмоний бромид) более чем 1 массовый процент от объёма спирта, она остается в качестве побочного продукта, даже в отожжённых образцах. На основании полученных данных для дальнейших синтезов использовался хлорид аммония в качестве такой добавки. Последовательное изучение фазового состава показало, что при температуре $150 - 250^\circ C$ происходит процесс разложения органической части молекулы, при температурах $450 - 500^\circ C$ начинают формироваться оксидные фазы, а к $600^\circ C$ гетерометаллические алкоксидные комплексы полностью разлагаются до двойных оксидов $HfO_2 - NiO$ либо до индивидуальных оксидов HfO_2 , NiO . Дальнейшее повышение температуры не приводит к изменению фазового состава. На основании полученных данных подобран режим водородного восстановления в автоклаве при температурах не выше $650^\circ C$ с получением соответствующих лигатур, используемых при производстве авиационных высокотемпературных сплавов.

Кроме того, показано, что электрохимический способ получения алкоксипроизводных $Hf-Ni$ с последующим восстановлением до индивидуальных оксидов HfO_2 , NiO подходит для разделения указанных металлов, а также упрощает возвращение никельсодержащих отходов металлургического производства (в том числе и при производстве изделий аддитивными методами) в производственный цикл.

2.2. Биология и медицина

Решение кристаллических структур лекарственных препаратов методом порошковой дифракции

Исследования проведены совместно с Институтом элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН (ИНЭОС РАН)

Процесс разработки новых лекарственных препаратов осуществляется множеством организаций как в Российской Федерации, так и за её пределами. Одной из важнейших задач при получении таких препаратов является определение молекулярного и кристаллического строения соединений, составляющих функциональные материалы и фармацевтические композиции. Исследования, охватывающие этапы разработки и производственного контроля, имеют важное значение как для социальной сферы, так и для экономики, поскольку они могут способствовать накоплению новых знаний в производстве лекарственных форм и снижению расходов на их разработку и преодоление патентных барьеров, установленных международными фармацевтическими компаниями.

Рентгеновская дифракция широко применяется на различных этапах разработки новых лекарственных форм, включая определение молекулярных и кристаллических структур активных фармацевтических ингредиентов, оптимизацию композиционных составов и контроль над соблюдением предписанных условий производства. Это позволяет предотвращать изменения в составе, вызванные такими факторами как влажность и температура, а также выявлять фазовые переходы и различные сольваты.

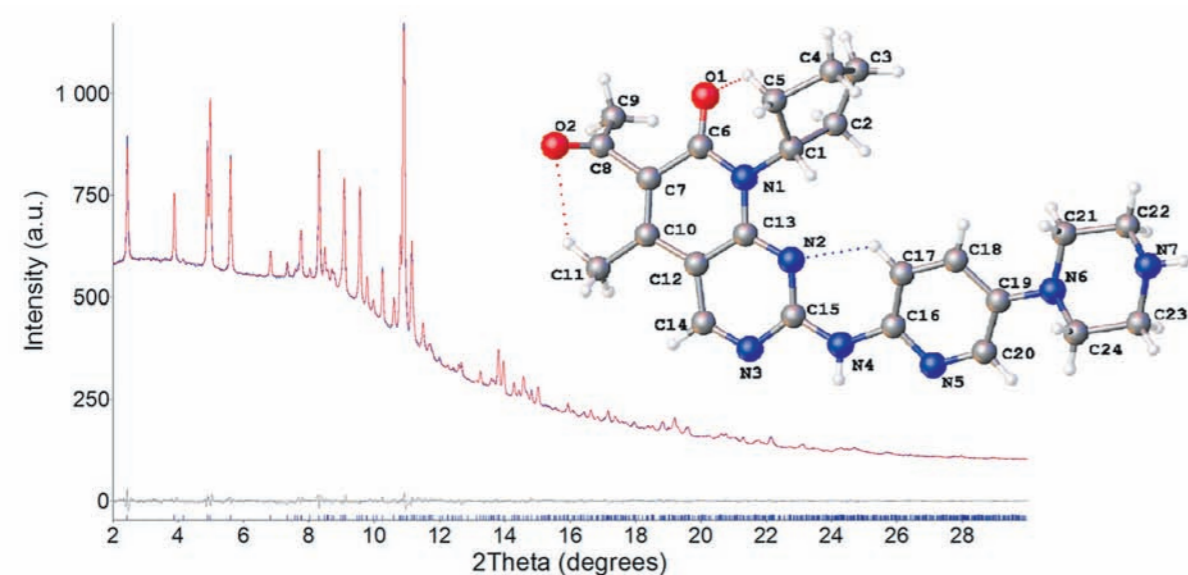


Рисунок 2.21. – Асимметричная структура палбоциклиба с нумерацией атомов, полученная после уточнения порошковых данных методом Ритфелда

Серия экспериментов, посвященных изучению кристаллической структуры лекарственных препаратов методом порошковой рентгеновской дифракции, была выполнена на станции Белок/РСА синхротрона «КИСИ-Курчатов». Получена информация о молекулярном и кристаллическом строении моногидрата гидрохлорида нилотиниба (препарат для лечения хронического миелолейкоза), гидрохлорида

рилпивирин (противовирусный препарат, использующийся для лечения ВИЧ/СПИДа), формы А палбоциклиба (препарат для лечения рака молочной железы), элсуфрина и его активной формы VM-1500A (препарат для терапии ВИЧ-1). В ходе исследований были установлены межмолекулярные взаимодействия, играющие ключевую роль в стабилизации кристаллической решётки, а также определены энергии этих взаимодействий. На рисунке 2.21 и 2.22 показана экспериментальная рентгеновская порошковая дифракция и структура исследуемой молекулы, а также кристаллическая упаковка соответственно.

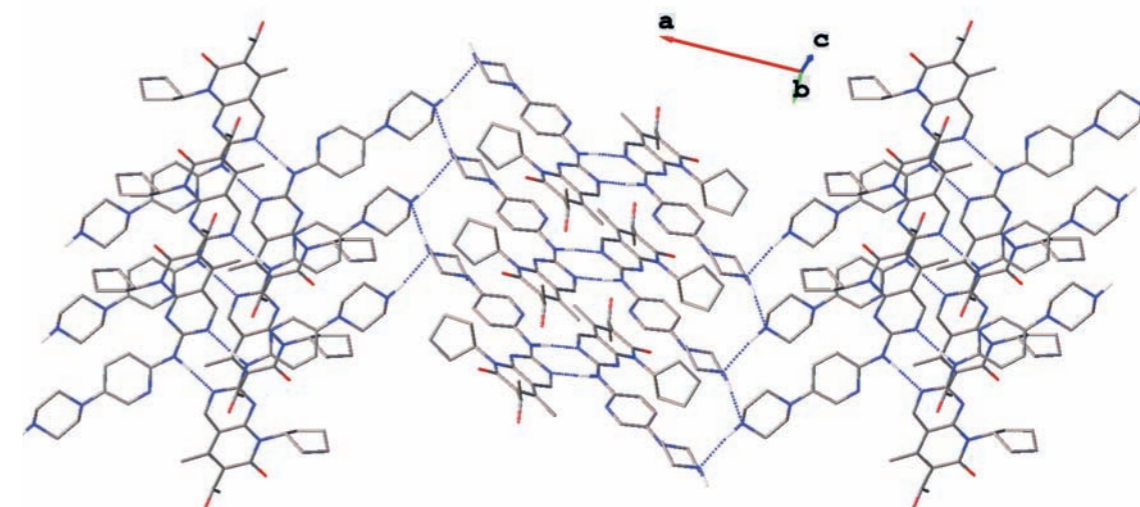


Рисунок 2.22. – Фрагмент слоев связей N...N в палбоциклибе. Водородные связи изображены пунктирными линиями

Kulikova E. et al. Crystal structure of palbociclib form A, $C_{24}H_{29}N_7O_2$ // Powder Diffraction. – 2024. – Т. 39. – № 4. – P. 270-274.

Исследование взаимодействия S-белка коронавируса с изолированными моделями клеточных мембран

Исследования проведены совместно с Государственным научным центром вирусологии и биотехнологии «Вектор» и Курчатовским комплексом НБИКС-природоподобных технологий

Пандемия коронавирусной инфекции COVID-19, вызванная вирусом SARS-CoV-2, является самой масштабной пандемией в XXI веке. Один из подходов к изучению молекулярных механизмов проникновения вируса в клетку базируется на использовании модельных систем, в частности, упорядоченных липидных монослоев, которые по своему составу и морфологии представляют собой адекватную модель биологических мембран. Взаимодействие эктодомена белка-шипа коронавируса человека с фосфолипидными монослоями, сформированными на поверхности водной субфазы, исследовано методами рентгеновской дифракции в геометрии скользящего падения на станции Ленгмюр синхротрона «КИСИ-Курчатов». Наблюдалась молекулярная организация монослоев нейтральных фосфолипидов – фосфатидилхолин (DPPC) и фосфатидилэтаноламин (DPPE) – после введения под монослой раствора белка. В экспериментах применяли рекомбинантный эктодомен S-белка, полученный с использованием клеточной линии CHO-K1. Установлено, что после введения белка нарушения кристаллической структуры монослоя не происходит. Для монослоев обоих фосфолипидов были проведены измерения методом изотерм сжатия. Обобщая представленные результаты, можно сделать вывод, что для обоих изученных фосфолипидов взаимодействие с S-белком не приводит к дестабилизации монослоя. Полученные экспериментальные данные указывают, что под действием S-белка не происходит «утечки» молекул из липидной системы.

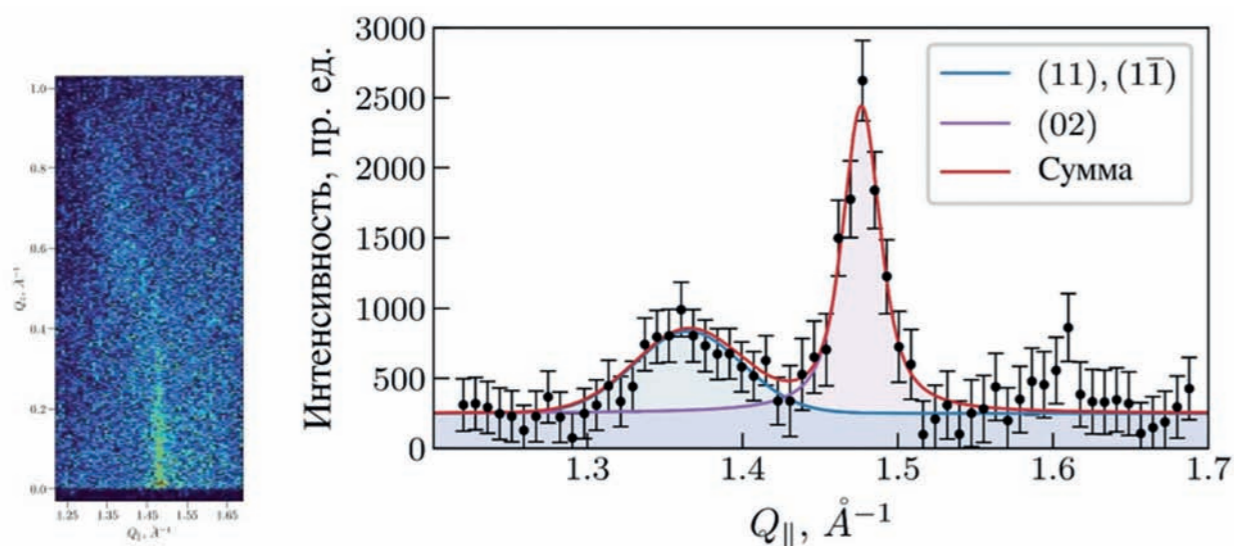


Рисунок 2.23. – Двумерные карты дифракционного рассеяния от фосфолипидного монослоя ДПФХ после введения под монослой раствора S-белка: а) двумерная карта дифракционного рассеяния; б) интегральная интенсивность дифракционного рассеяния

Таким образом, причины нарушения липидного баланса у пациентов, инфицированных SARS-CoV-2, по-видимому, обусловлены другими факторами. Это, в свою очередь, имеет важное значение для

понимания молекулярных механизмов развития COVID-19-ассоциированной дислипидемии. На рисунке 2.23 показаны двумерные карты дифракционного рассеяния от фосфолипидного монослоя ДПФХ после введения под монослой раствора S-белка.

Rogachev A.V., Malysheva N.E., Novikova N.N., Kovalchuk M.V. et al. Study of the Interaction of the S-Protein of SARS-CoV-2 with Isolated Lipid Model Membranes // Crystallography Reports. – 2024. – Т. 69. – № 6. – P. 931-938.

Многофункциональный люминесцентный металлоорганический каркас для обнаружения подделок кулинарного масла

Исследования проведены совместно с Институтом неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН (ИНХ СО РАН)

Растительные масла используются в кулинарии в качестве основы для жарки, тушения и выпечки, в косметологии в качестве компонентов кремов, лосьонов и массажных масел, в медицине и других областях. Наиболее распространенными видами пищевых растительных масел являются оливковое, подсолнечное, кокосовое, хлопковое и кунжутное масла.

Подсолнечное масло является одним из самых популярных видов растительных масел, которое используется для приготовления жареных блюд, выпечки, заправки салатов и других кулинарных целей. Оно имеет высокую температуру дымления и не теряет своих свойств при нагревании. Мировое производство подсолнечного масла в 2022 году составило 20141 млн тонн, что соответствует около 8% от всего потребления пищевых масел.

Фальсификация подсолнечного масла является общеизвестной проблемой рынка пищевых масел и, как правило, заключается в разбавлении подсолнечного масла более дешевыми маслами, например, хлопковым. Хотя смешивание пищевых высококачественных масел не представляет никакой опасности для здоровья, масло, используемое для фальсификации, часто бывает некачественным и может иметь повышенное содержание госсипола.

Госсипол – это натуральный продукт, который хлопчатник вырабатывает для защиты от насекомых-вредителей, и он в основном концентрируется в семенах и листьях. Побочным продуктом производства хлопка является мука из семян хлопка – ценный источник жиров и белков для скота. Однако его использование в качестве корма для животных ограничено из-за токсичности госсипола. Некоторые виды хлопчатника вырабатывают так много госсипола, что его содержание может достигать 34 г на 1 кг семян хлопчатника. Поскольку госсипол нерастворим в воде, но частично растворим в жирах и маслах, нерафинированное хлопковое масло содержит значительные количества госсипола. Госсипол является природным полифенолом и ингибитором ряда ферментов-дегидрогеназ и из-за этого очень токсичен для человека. Его воздействие приводит к гепатотоксичности, бесплодию и иммунотоксичности. Клиническое исследование в Китае показало, что из всех добровольцев, потреблявших всего 50 мг госсипола в неделю в течение 1 года, у 10% развился необратимый асперматогенез.

Подходы к обнаружению фальсификации масла посредством мониторинга определенных компонентов известны из литературы, но они включают сложные и дорогостоящие методы, такие как ЯМР, SERS, FT-IR или УФ-видимая спектроскопия, газовая хроматография или дифференциальная импульсная вольтамперометрия, и ни один из методов не использовал госсипол в качестве маркера.

В настоящее время люминесцентное зондирование органических и неорганических загрязняющих веществ с использованием металлоорганических структур (MOF) интенсивно развивается и обе-

спечивает высокую чувствительность, селективность и возможность создания портативных устройств для полевых работ. Недавно в Институте Неорганической Химии СО РАН (ИНХ СО РАН) было показано, что MOF, созданный с использованием линкеров, полученных из бензо-2,1,3-тиадиазола с имидазольными фрагментами, способен обнаруживать госсипол в субмикромольных концентрациях посредством эффекта гашения люминесценции.

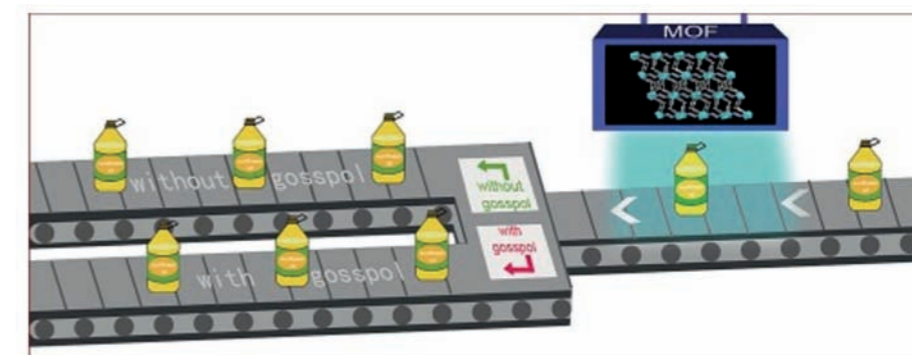


Рисунок 2.24. – Схема применения разработанного MOF для детектирования наличия госсипола

Расширяя исследования на другие лиганды на основе бензо-2,1,3-тиадиазола, в ИНХ СО РАН разработали новую металлоорганическую структуру на основе лигандов 4,7-ди(1,2,4-триазол-1-ил)бензо-2,1,3-тиадиазола (tr2btd) и 4,4'-сульфонилдипензойной кислоты (H2dcdds) с улучшенной чувствительностью к госсиполу и выдвинули гипотезу, что путем обнаружения госсипола в образцах подсолнечных масел можно отличить подлинный продукт от масла с добавлением хлопкового масла (рисунок 2.24). При возбуждении люминесценции длиной волны 290 нм для данного MOF наблюдается сильный эффект гашения люминесценции. При концентрации госсипола 50 мкМ интенсивность составляет 25% относительно интенсивности контрольного измерения.

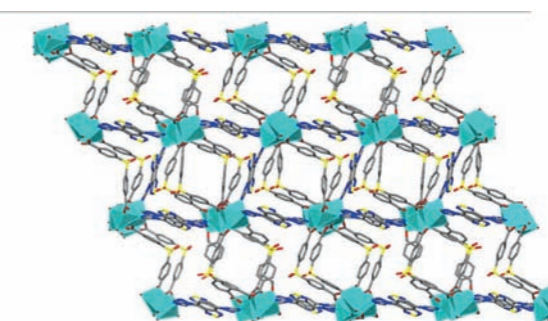


Рисунок 2.25. – Модель кристаллической структуры нового MOF

На станции Белок-РСА Курчатовского источника синхротронного излучения методом монокристаллической дифракции были исследованы кристаллы нового синтезированного MOF и получена модель его кристаллической структуры (рисунок 2.25). Полученные результаты будут использованы при создании новых датчиков госсипола для повышения контроля качества кулинарных масел.

Pavlov D. I. et al. Multiresponsive luminescent metal-organic framework for cooking oil adulteration detection and gallium (III) sensing // Food Chemistry. – 2024. – Т. 445. – P. 138747.

Новый подход в визуализации суставов, контрастированных с помощью рентгеноконтрастных наночастиц

Исследования проведены совместно с Курчатовским комплексом кристаллографии и фотоники

Заболевания опорно-двигательного аппарата в настоящее время все чаще приводят к инвалидности и выходят на четвертое место после диабета, онкологических и сердечно-сосудистых заболеваний. Эти заболевания наиболее часто связаны с суставами. Остеоартрит (ОА) – наиболее распространенное заболевание суставов, характеризующееся дегенеративными изменениями в суставном хряще. В настоящее время непрерывно проводятся исследования в области диагностики и лечения артрологических заболеваний в биомедицинских лабораториях мира. Однако существенных успехов в лечении ОА не достигнуто. ОА трудно диагностируется, особенно на ранних стадиях заболевания. Для диагностики ОА обычно используют артроскопию сустава – достаточно сложную, инвазивную процедуру визуального наблюдения дефектов суставной поверхности. Среди дефектов суставного хряща различают поверхностное истощение протеогликанов, разориентацию коллагеновых фибрилл и уменьшение содержания коллагена, которые невозможно различить ни рентгенографически, ни с помощью радиографии. Магниторезонансная томография, являющаяся «золотым» стандартом диагностики суставов, требует значительных затрат времени для получения и обработки изображений, а компьютерная томография не обеспечивает достаточного пространственного разрешения.

Целью данной работы являлась разработка новых подходов в диагностике повреждений суставного хряща с помощью синхротронного излучения, фазоконтрастной визуализации и рентгеноконтрастных наночастиц.

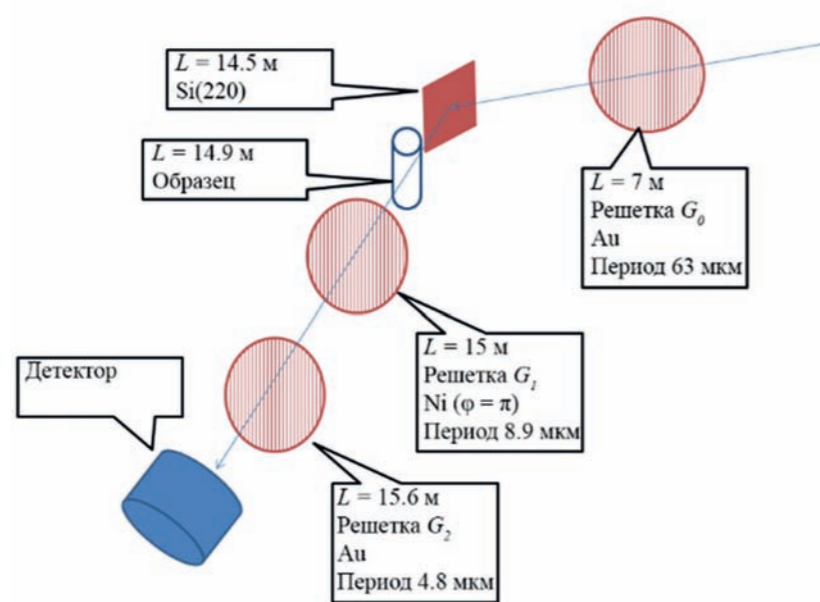


Рисунок 2.26. – Схема проведения эксперимента по радиографии на станции Медиана. В выносках указаны расстояния от источника СИ до узла установки

Модельными объектами служили полипропиленовые пластинки с нанесенными слоями гидрогеля, пропитанного наночастицами щелочных оксидных бронз титана и молибдена. Полиакриловый гидрогель с наночастицами готовили из сухого концентрата, предназначенного для приготовления геля для УЗИ (ООО «Гельтек-Медика»). Наночастицы бронз $\text{Na}_{0.2}\text{TiO}_2$ и $\text{H}_{0.3}\text{MoO}_3$ размером ~20 нм были получены седиментационным разделением коллоидных растворов.

Радиографические исследования методом фазоконтрастной визуализации проводились на станции Медиана синхротрона «КИСИ-Курчатов» при энергии фотонов $E=25$ кэВ. Для достижения условий фазового контраста использовался интерферометр Тальбота–Лау с тремя решетками: решеткой – источником G_0 (период 63 мкм, толщина слоя Au 54 мкм), фазовой решеткой G_1 (период 8,92 мкм, толщина Ni 8,8 мкм, что соответствует сдвигу фазы на π) и амплитудной решеткой G_2 (период 4,8 мкм, толщина Au 50 мкм). Детектор на основе сцинтиллятора и КМОП-матрицы имел размер пикселя 5 мкм. На рисунке 2.26 представлена схема проведения эксперимента.

В результате проведенных экспериментов на пучке синхротронного излучения получены рентгенографические снимки модельных образцов и хрящевой ткани (рисунок 2.27).

На модельных образцах видны отдельные сгустки вещества размером до 0,5 мм, как правило, $\sim 100 \pm 50$ мкм. Контраст преимущественно абсорбционный. На снимках (рисунках 2.27 а и 2.27 б) видны отличающиеся по контрасту сгустки по отношению к неоднородному фону основного вещества геля. Сгустки рентгеноконтрастного вещества, по-видимому, представляют собой агломераты наночастиц $\text{Na}_{0.2}\text{TiO}_2$ и $\text{H}_{0.3}\text{MoO}_3$, заключенных в порах. Отметим, что сгустки на рисунке 2.27 б имеют продолговатую форму, которая соответствует иглообразным наночастицам $\text{H}_{0.3}\text{MoO}_3$.

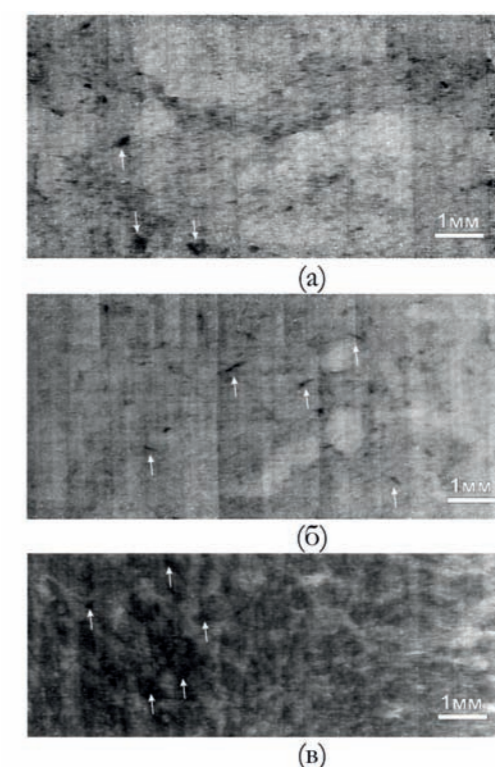


Рисунок 2.27. – Рентгенографические снимки модельных образцов (а,б) и хрящевой ткани (в), стрелками указаны агломераты частиц

Наночастицы $\text{Na}_{0.2}\text{TiO}_2$ агломерируют с образованием округлых сгустков. Образец хрящевой ткани (рисунок 2.27в) показывает развитую неоднородную структуру с характерным размером 0,3–0,4 мкм.

Таким образом показано, что проекционная фазоконтрастная радиография на источнике СИ позволяет выявить внутреннюю структуру суставного хряща и распределение наночастиц в проекции на плоскость экрана. При помощи компьютерной обработки полученных рентгеноконтрастных изображений можно измерить распределение наночастиц в суставном хряще.

Полученные результаты будут использованы в дальнейшей работе по развитию методов диагностики и терапии хрящевой ткани, в частности, такого заболевания, как остеоартрит.

Исследования образцов ДНК-белковых комплексов гистонopodobных белков при различных концентрациях и в различных условиях среды

Исследования проведены совместно с Курчатковским комплексом кристаллографии и фотоники

Гистонподобные белки (НУ-белки) играют важную роль в процессах, связанных с функционированием ДНК. Так, они присутствуют в бактериальных клетках на поздней стационарной стадии роста при формировании защитного комплекса, а также участвуют в процессах трансформации структуры ДНК (репликации и транскрипции). Помимо этого, эти белки играют важную роль в организации и компактизации хроматина. Такое сочетание структурных и регуляторных ролей оказывает серьезное влияние на функционирование нуклеоида в целом и тесно связано с его организацией.

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) является одним из самых распространенных и в то же время информативных первичных методов структурного анализа для изучения макромолекул в растворе, т.е. в условиях, близких к физиологическим. Наиболее эффективно МУРР используется в комбинации с другими экспериментальными структурными методами, такими как рентгеновская кристаллография, ядерный магнитный резонанс, атомно-силовая и криоэлектронная микроскопия.

В последнее время экспериментальные данные МУРР все чаще дополняют чисто теоретическим методом моделирования молекулярной динамики (МД) для улучшения интерпретации получаемых данных. При наличии структурных моделей, полученных другими методами, включая МД симуляцию, МУРР позволяет проводить их скрининг, для определения наиболее вероятных конфигураций молекулы в растворе. Выбор оптимальной структурной модели происходит путем сравнения теоретических кривых малоуглового рассеяния, рассчитанных для набора разных моделей, с экспериментальными данными МУРР с целью выявления наилучшего согласия.

Исследования образцов ДНК-белковых комплексов методом МУРР проводили на станции БиомУР синхротрона «КИСИ-Курчатов», результаты показаны на рисунке 2.28.

Многофазное трехмерное *ab initio* моделирование методом конечных объемных элементов проводили в программе MONSA. Программа позволяет задавать желаемое соотношение объемов отдельных фаз. Результаты структурного восстановления ДНК-белковых комплексов, полученных в МУРР эксперименте, затем сравнивали с моделями комплексов, сгенерированными в процессе МД симуляции, используя программу CRY SOL, которая рассчитывает невязку между теоретическими кривыми рассеяния от МД моделей и экспериментальными данными МУРР $\{\chi^2\}$. С помощью такой процедуры были выбраны репрезентативные модели с наименьшей невязкой для комплексов. Результаты работы представлены на рисунке 2.28.

В большинстве случаев расчетные кривые хорошо ложатся на экспериментальные точки. Тем не менее, следует отметить небольшие остаточные отклонения теоретических кривых, полученных от моделей МД по сравнению с *ab initio* моделями, что объясняет довольно высокие значения χ^2 по сравнению

с невязкой в *ab initio* моделировании по данным МУРР. Можно предположить, что это связано с сосуществованием нескольких конформаций комплексов в растворе, находящихся в равновесии друг с другом. В этом случае *ab initio* моделирование дает усредненную форму, которая может включать в себя особенности различных конформаций, тогда как МД модели имеют жестко зафиксированную атомную структуру.

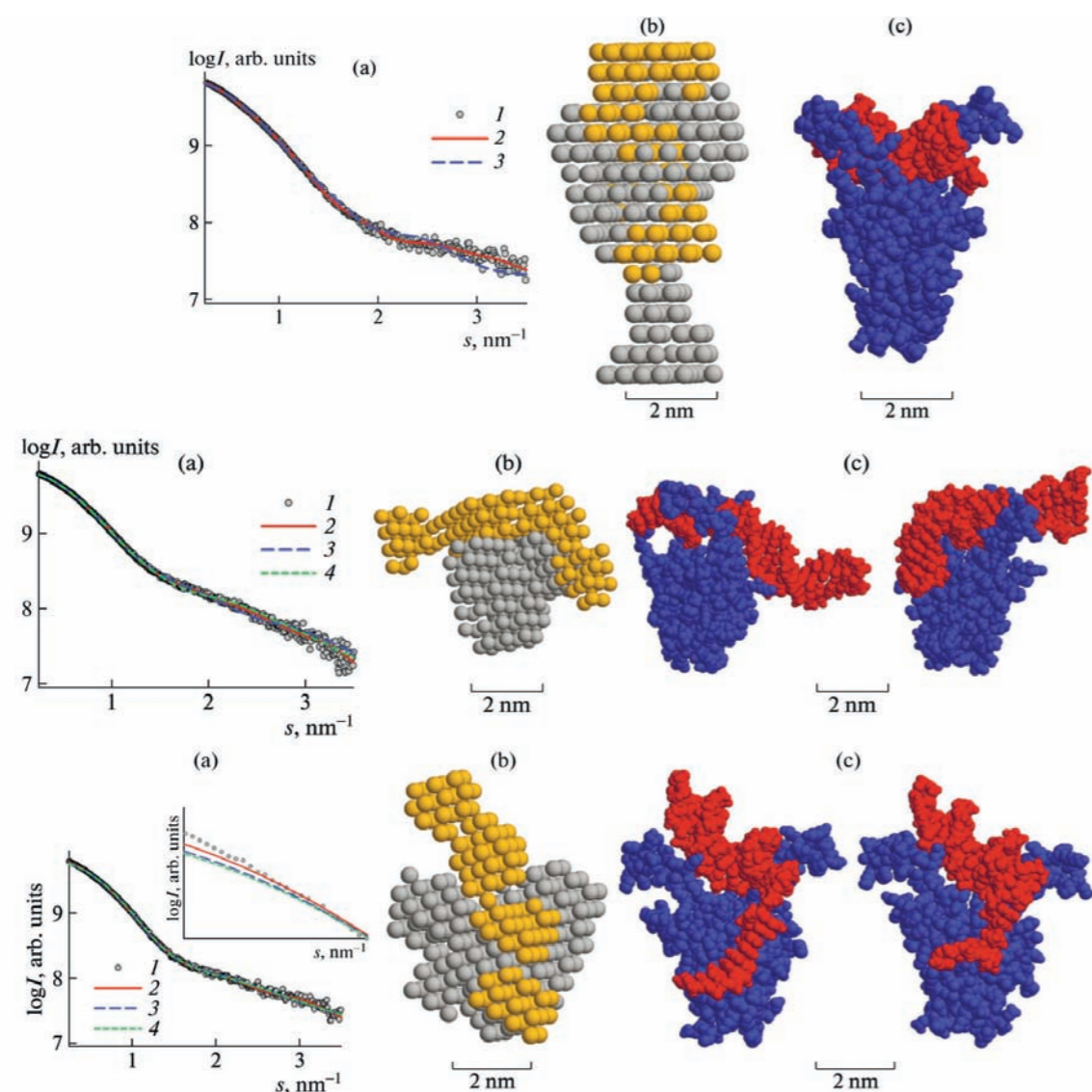


Рисунок 2.28. – Совместное использование методов МУРР и МД для моделирования структуры ДНК-белковых комплексов, образуемых гистоноподобным белком H1Mgal с ДНК дуплексами различной длины и природы:
 (а) – профили МУРР 1 – экспериментальные данные МУРР, 2 – приближение мультифазной *ab initio*-моделью, 3, 4 – приближения двумя наилучшими моделями, полученными МД; (б) – шариковая *ab initio*-модель; (с) –наилучшие МД конформации комплекса. Белок и ДНК на панелях (б) и (в) показаны разным цветом

Проведенное нами сопоставление результатов структурного моделирования, проведенного с помощью методов МД и МУРР подтвердило высокую комплементарность двух методов. Теоретически-предсказанная стехиометрия комплексов полностью соответствовала стехиометрии комплексов в растворе по данным МУРР. Тогда как более точное приближение экспериментальных данных МУРР *ab initio* моделями по сравнению с моделями МД было объяснимо гибкостью конформаций комплекса в растворе, которое не может быть идеально описано с помощью единственной жесткой атомной модели. Таким

образом, разработанная методика совместного анализа результатов, полученных экспериментальным и вычислительным методом, позволила получить наиболее достоверные модели ДНК-белковых комплексов, которые могут быть успешно использованы в области драг-дизайна и других фармакологических исследованиях. Применение комбинированной методики МД-МУРР представляет новые возможности для расшифровки структуры макромолекул в растворах, что имеет высокую ценность для разработки новых видов фармакологически значимых ингибиторов фермента, которые будут подавлять устойчивость бактерий к антимикробным пептидам. В качестве направлений внедрения полученных структурных результатов выступают биотехнология и фармакология, в частности, направления разработки терапевтических противоиных средств.

Новые противоопухолевые препараты на основе комплексов Cu(II)

Исследования проведены совместно с Южным федеральным университетом (ЮФУ)

Разработка и изучение свойств координационных соединений Cu(II) с гидразоновыми лигандами вызывает значительный научный интерес благодаря их высокой практической ценности в фармакологии и медицине. Это связано с их выраженной цитотоксичностью, что открывает широкие перспективы для разработки новых лекарственных препаратов и терапевтических подходов.

На станции Белок/РСА синхротрона «КИСИ-Курчатов» методом рентгеноструктурного анализа установлено строение комплексов, являющихся прекурсорами потенциальных противоопухолевых препаратов. Исследованные комплексы получены взаимодействием перхлората, нитрата и бромида Cu(II) с бис-гетарилгидразами (органическими азотсодержащими гетероциклическими лигандами).

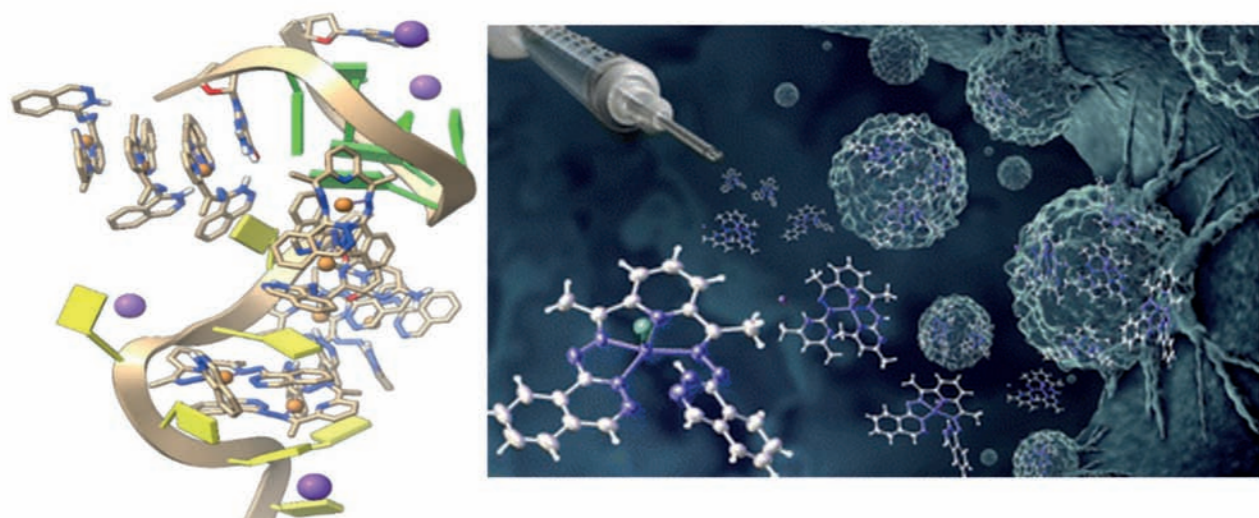


Рисунок 2.29. – Слева - модель взаимодействия одного из комплексов с фрагментом ДНК, содержащим основания гуанина (зеленый) и цитозина (желтый)

Испытания цитотоксической активности полученных соединений *in vitro* на клеточных линиях гепатоцеллюлярной карциномы человека и неопухолевых фибробластах легких человека показали, что комплексы проявляют более высокую активность по сравнению с известным противораковым средством цисплатином. Кроме того, хелаты металлов оказались менее токсичными для неопухолевых клеток. Исследование связывания комплексов с белком бычьим сывороточным альбумином (БСА) с помощью флуоресцентной спектроскопии показало, что комплексы меди прочно связываются с БСА. Противоопухолевая активность изучаемых медных комплексов обусловлена их встраиванием между цепями ДНК (при взаимодействии с гуанином и цитозином) и запуском апоптоза (программируемой смерти) клетки. Для изучения механизма взаимодействия комплексов с ДНК раковых клеток было проведено молекулярно-динамическое моделирование соединения.

Полученные структурные данные и результаты молекулярного моделирования позволят проводить направленный дизайн лекарственных препаратов на основе исследованных комплексов.

2.3. Культурное наследие

Совмещение результатов нейтронной и синхротронной томографии

Исследования проведены в Курчатовском комплексе синхротронно-нейтронных исследований

При исследовании внутреннего строения комплементарными методами синхротронной и нейтронной томографии, что актуально для объектов, состоящих из веществ, сильно различающихся по ослаблению этих типов проникающего излучения, возникает задача совместного анализа полученных результатов. Для решения этой задачи был разработан математический алгоритм, позволяющий представлять данные обоих исследований, получаемые в разных экспериментальных условиях, в единой системе координат. Преимущество такого подхода заключается в отсутствии необходимости наносить дополнительные контрастные метки на поверхность образца, что актуально при изучении уникальных музейных объектов палеонтологии, зоологии и культурного наследия. Метод совмещения основан на определении координат четырех опорных точек и аффинного преобразования системы координат.

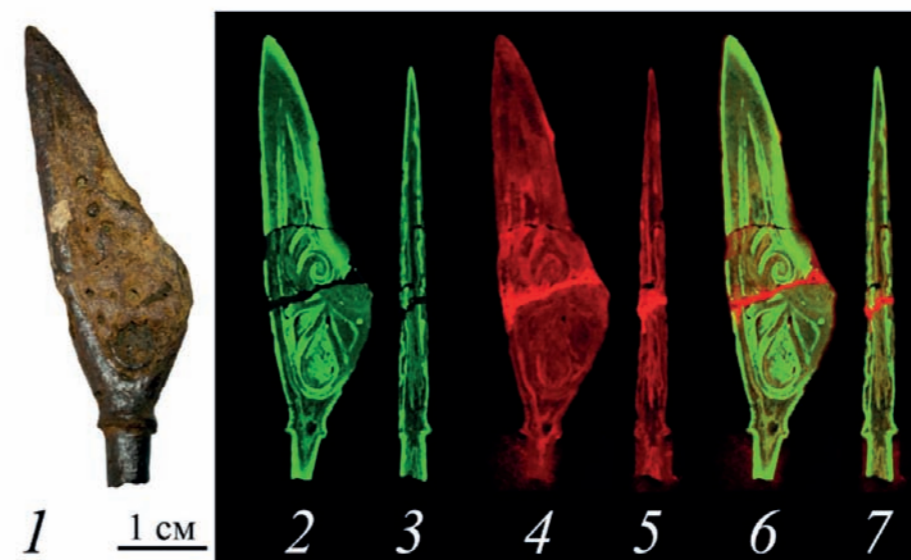


Рисунок 2.30. – Фотография наконечника стрелы из кургана Черная могила (X в.) [1]; продольное [2] и поперечное [3] томографические сечения объекта, полученные с помощью синхротронного излучения; продольное [4] и поперечное [5] томографические сечения, полученные с помощью тепловых нейтронов; суммарные синхротронно-нейтронные изображения [6-7]

Совмещение результатов нейтронной и синхротронной томографии выполнено на примере данных исследований древнего оружия (наконечника стрелы из черниговского кургана Черная могила (X в.), рисунок 2.30, 1). Синхротронная томография проводилась на станции ЛИГА синхротрона «КИСИ-Курчатов», нейтронная – на установке ДРАКОН реактора ИР-8. Преобразованные массивы синхротронной и нейтронной томографии представлены в цветовой модели RGB, где синхротронные изображения окрашены в зеленый цвет (рисунок 2.30, 2-3), а нейтронные – в красный (рисунок 2.30, 4-5). На продольных синхротронных сечениях отчетливо видны элементы декора (рисунок 2.30, 2), на нейтронных сечени-

ях – участки, состоящие из реставрационной мастики (органическое водородсодержащее вещество, рисунок 2.30, 4). На поперечных синхротронных сечениях дифференцируется корка окалины (рисунок 2.30, 3) под небольшим слоем продуктов коррозии, в то время как на поперечных нейтронных сечениях она практически не видна (рисунок 2.30, 5), что говорит о малом содержании водорода в ее веществе по сравнению с другими составными частями объекта. После суммирования двух трехмерных массивов синхротронной и нейтронной томографии получается полный объем информации об объекте в одном массиве данных. При этом участки объекта, ослабляющие только один тип излучения, остаются окрашенными в один из основных цветов модели RGB, остальные участки приобретают цвет за счет смешения основных цветов (рисунок 230, 6-7).

Исследование металлической «чаши» с головным наборным венчиком из селища Абакумлево-3 методом нейтронной томографии

Исследования проведены совместно с Институтом Археологии РАН и Курчатовским комплексом НБИКС-природоподобных технологий

Исследования объектов культурного наследия имеют важное историческое значение. В связи с тем, что подобного рода объекты существуют в единственном экземпляре, необходимо использовать современные неразрушающие методы исследования, такие как нейтронная визуализация. При раскопках селища Абакумлево 3 (датируется второй половиной V–VI/VII вв.) в Суздальском районе Владимирской области обнаружена металлическая «чаша» (предположительно, серебряная), внутри которой располагается головной венчик – наборное украшение из четырех кожаных шнуров с нанизанными на них пронизками (рисунок 2.31, 1-2). Данная емкость входила в состав «клада» предметов женского поволжско-финского костюма. Высота «чаши» – 6 см, верхний диаметр – 11,9 см, нижний диаметр – 8,75 см, толщина стенки у дна – 1,5 мм, у устья – 5 мм. По материалам могильников подобные изделия широко известны, но они имеют другую конструкцию. Шнуры с пронизками обычно фиксировались либо на кожаной ленте, либо на ткани. Между сложенной лентой, как со стороны устья «чаши», так и со стороны дна наблюдается прослойка текстиля. Подобное сочетание металлической «чаши» и венчика с прослойками текстиля (т.е. материала органического происхождения), а также габариты предмета подразумевают, что наиболее информативным методом изучения его конструкции является нейтронная томография.

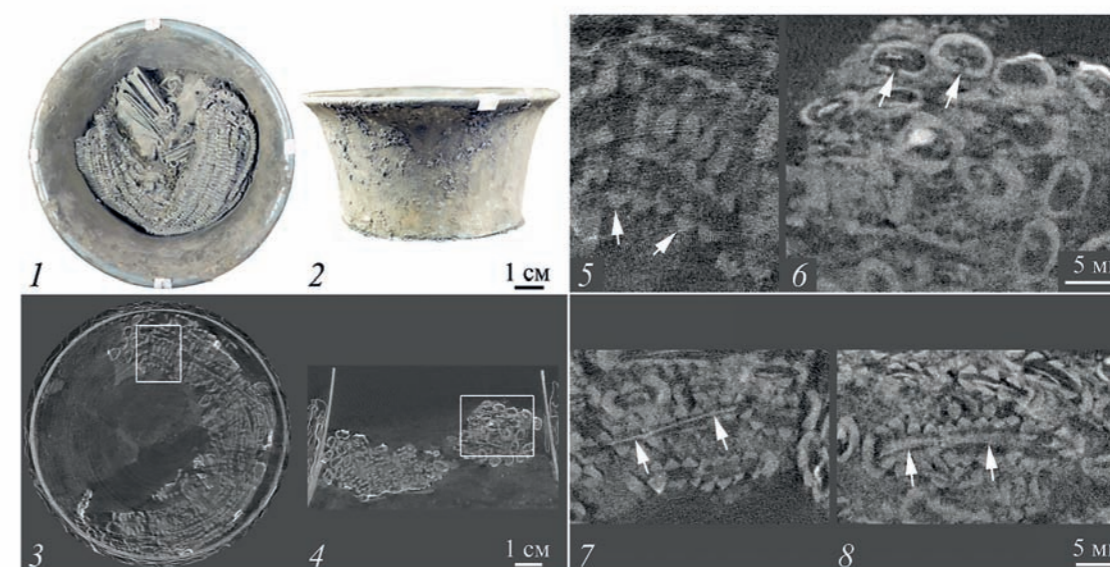


Рисунок 2.31. – Результаты нейтронной томографии металлической «чаши» из Абакумлево-3 (Суздальский р-н Владимирской обл.): фотографии со стороны устья «чаши» [1] и сбоку [2]; поперечное [3] и продольное [4] сечения «чаши»; сечение поперек пронизок [5, отмечены стрелками]; сечение вдоль пронизок с зонами стыка концов проволоки [6, отмечены стрелками]; поперечное [7] и продольное [8] сечения фрагмента шнура (отмечен стрелками), проходящего через отверстия в пронизках. Области, соответствующие 5 и 6, обозначены прямоугольниками на 3 и 4 соответственно

Методом нейтронной томографии на экспериментальном стенде ПОНИ реактора ИР-8 определены основные элементы конструкции головного венчика, расположенного внутри металлической «чаши». Венчик состоит из скобчатых разомкнутых проносок размерами $\sim 5 \times 3 \times 2$ мм (рисунок 2.31, 3-6), надетых на частично сохранившийся уплощенный шнур размерами до $\sim 0,3 \times 1,0$ мм (рисунок 2.31, 7-8). Пронизки выполнены из металлического прута, имеющего в сечении форму, близкую к равнобедренному прямоугольному треугольнику с гипотенузой 1,8-2,0 мм и высотой $\sim 1,0$ мм (рисунок 2.31, 5). Венчик сложен в 4 слоя и помещен на дно «чаши», в стенках которой регистрируются газовые полости размерами до 2,2 мм, характерные для производства методом литья.

Интерпретация информации о сохранности и расположении текстильного покрытия осложнена наличием почвенных загрязнений, имеющих близкое к ткани ослабление тепловых нейтронов, а также присутствием клеевого состава, которым фиксировались пронизки после расчистки содержимого «чаши». Выявлено, что текстиль покрывает сверху сложенные шнуры с пронизками, крепление шнуров к текстилю не обнаружено. Вероятно, текстиль представлял собой мешочек для хранения изделия. Полученные данные помогут уточнить назначение текстиля, а также будут применены при извлечении венчика из чаши, его реставрации и закреплении.

Анализ конструкции и материала средневековых перстневых вставок

Исследования проведены совместно с Институтом Археологии РАН и Курчатовским комплексом НБИКС-природоподобных технологий

Находки ювелирных изделий имеют большое значение при изучении технологий и традиций древних людей. Одним из богатейших источников информации о жизни населения Древней Руси являются раскопки в Новгороде Великом. В 2020 году при раскопках Немецкого двора (XIV в.) экспедицией Института археологии РАН были найдены 2 перстневые вставки из прозрачного материала, представляющие собой 2 соединенные полусферы (рисунок 2.32, 1, 3). Предполагается, что они имитировали полудрагоценные камни. Подробного детального анализа на современном уровне аналогичных находок не проводилось или они не были опубликованы в открытой печати.

Анализ конструкции и материала двухчастных перстневых вставок проведен методом нейтронной томографии на установке ДРАКОН реактора ИР-8. На проекциях объектов, полученных в монохроматическом нейтронном пучке, для каждой из полусфер, составляющих вставку, наблюдаются эффекты дифракции нейтронов, проявляющиеся в виде ослабления и последующего восстановления значений интенсивности прошедшего пучка («мерцания») в узком угловом диапазоне поворота объектов. Такое ослабление связано с тем, что в определенном угловом положении монокристаллы, из которых изготовлены части вставок, входят в отражающее положение, и часть интенсивности пучка ($\sim 5-10\%$, рисунок 2.32, 1) выводится из формирования изображения. Эти области и есть изображения кристаллов. Кроме того, дифракционная природа контраста на нейтронных проекциях подтверждается наличием дифракционных отражений на пустом поле вокруг объектов (рисунок 2.32, 2). Размеры областей ослабления интенсивности $\sim 9-10$ мм, что соответствует максимальному размеру полусфер каждой из вставок.

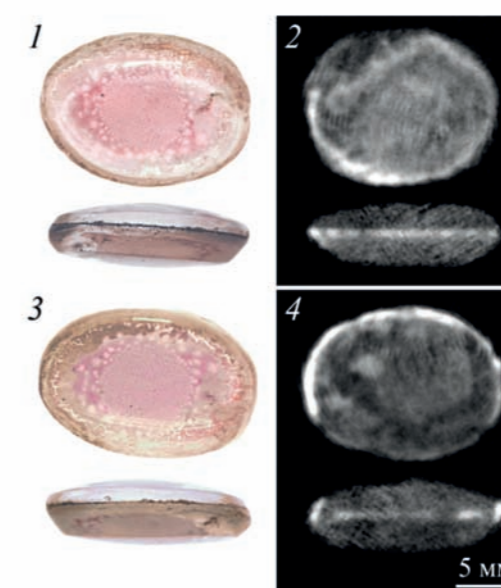


Рисунок 2.32. – Фотографии (1, 3) и нейтронные томографические сечения (2, 4) двухчастных перстневых вставок из прозрачного материала (раскопки ИА РАН, XIV в.): 1, 2 – № 2221; 3, 4 – № 2223

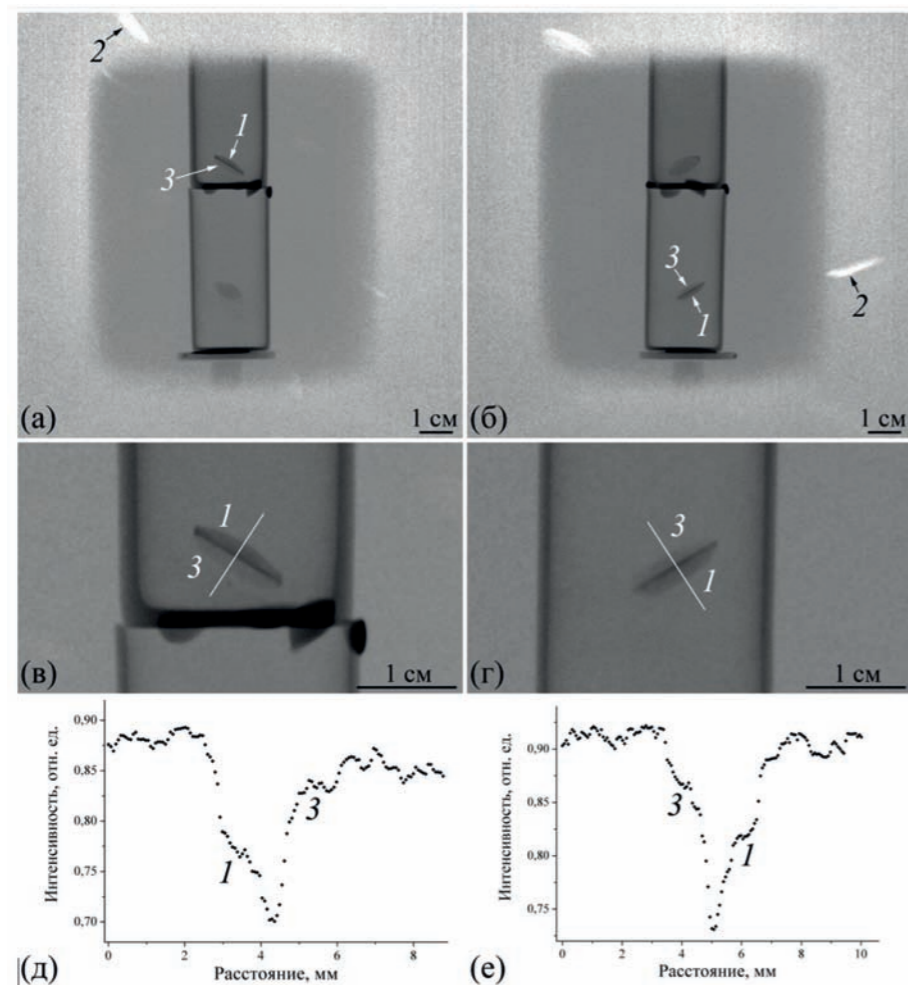


Рисунок 2.33. – Дифракционно контрастная визуализация перстневых вставок в монохроматическом нейтронном пучке, при которой одна из частей вставок находится в отражающем положении: а, в – у вставки № 2223; б, г – у вставки № 2221; д, е – профили интенсивности вдоль линий, указанных на в и г соответственно. 1 – ослабление интенсивности прямого пучка, прошедшего через полусферу вставки, находящуюся в отражающем положении; 2 – дифракционное отражение вне прямого пучка, соответствующее 1; 3 – ослабление интенсивности прямого пучка, прошедшего через часть вставки без отражения

По данным томографической реконструкции каждая вставка состоит из двух плоско-выпуклых частей (полусфер), совмещенных плоскими гранями (рисунок 2.33, 2, 4). Материал полусфер в целом однороден. В зоне совмещения наблюдается неоднородный слой толщиной ~300 мкм сильно ослабляющего тепловые нейтроны вещества, вероятно, органического происхождения (рисунок 2.33, 2, 4). Полученные данные дополняют реконструкцию технологического процесса изготовления средневековых ювелирных имитаций полудрагоценных камней, вставляемых в перстневую оправу древними мастерами.

Исследование металлических поясных накладок методом нейтронной томографии

Исследования проведены совместно с Государственным историческим музеем и Курчатовским комплексом НБИКС-природоподобных технологий

В изучении металлических изделий малой пластики средневековья томографические данные позволяют получать новую углубленную информацию о конструкции таких предметов, существенно расширяя знания о технологических приемах различных исторических эпох. Поясные накладки, один из часто встречающихся видов украшений, могли иметь несколько вариантов изготовления, в частности связанных с методом крепления: литье по утрачиваемой модели сразу с готовыми шпеньками, закрепление шпеньков пайкой или их механическая фиксация. Нейтронная томография применялась для уточнения специфики крепления крепежных шпеньков к металлической основе.

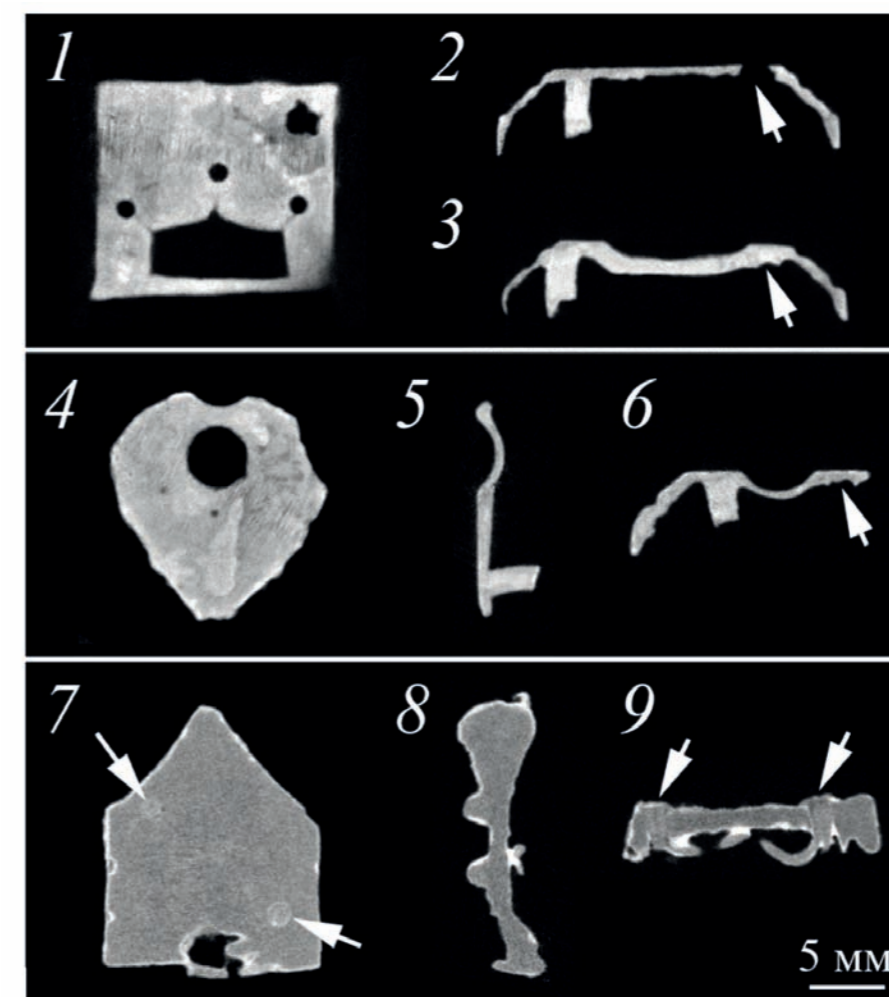


Рисунок 2.34. – Результаты нейтронной томографии древнерусских поясных накладок: 1-3 – СУЗАЭ-15 № 127, 4-6 – СУЗАЭ-2013 № 18А/68, 7-9 – СУЗАЭ-2014 № 746/150. Стрелками обозначены утраченные (2) или поврежденные (3,6) шпеньки, а также проволочные крепления (7,9)

На экспериментальном стенде ПОНИ исследовательского реактора ИР-8 с помощью нейтронной томографии изучены поясные накладки трех наиболее распространенных в Суздальском ополье типов, которые были обнаружены в ходе полевых работ Суздальской археологической экспедиции ИА РАН

в 2013-2015 гг. (СУЗАЭ-2013 №18А/68, СУЗАЭ-2014 №746/150, СУЗАЭ-15 №127). Все наклейки имеют удовлетворительную сохранность, на их поверхности наблюдается неравномерный слой продуктов коррозии толщиной до 300 мкм. У наклеек СУЗАЭ-15 № 127 и СУЗАЭ-2013 № 18А/68 металлическая пластина основы представляет собой единую конструкцию со шпильками. Шпильки наклеек №№ 127 и 18А/68У имеют округлое поперечное сечение диаметром около 2 мм. У наклейки № 127 таких шпильков было 4 (рисунок 2.34, 1-3), один из которых полностью утрачен с фрагментом пластины (рисунок 2.34, 2), а еще один обломан у основания (рисунок 2.34, 3). Наклейка № 18А/68 имела 3 шпильки (рисунок 2.34, 4-6), один из которых также обломан у основания (рисунок 2.34, 6). Наклейка СУЗАЭ-2014 № 746/150 отличается по конструкции от двух других: в пластине основы наблюдаются 2 сквозных отверстия диаметром ~1.3 мм, в которые вставлена проволока, вероятно, применявшаяся для фиксации наклейки (рисунок 2.34, 7, 9). Таким образом, с помощью нейтронной томографии уточнены способы закрепления шпильков к металлической основе для трех типов поясных наклеек: литые сразу с готовыми шпильками или их механическая фиксация.

Исследование фрагментов скелета ископаемой акулы с помощью рентгеновской томографии

Исследования проведены совместно с Санкт-Петербургским государственным университетом

С помощью рентгеновской томографии проведено исследование фрагмента скелета гибодонтной акулы из среднепермских отложений Поволжья. Подобные находки крайне редки и уникальны, а их механическое или химическое препарирование без разрушения невозможно. Выявлено расположение хрящевых частей скелета, зубов и чешуи (рисунок 2.35), детальная трехмерная реконструкция которых позволит описать новый таксон и сравнить с уже известными акулами пермского периода.

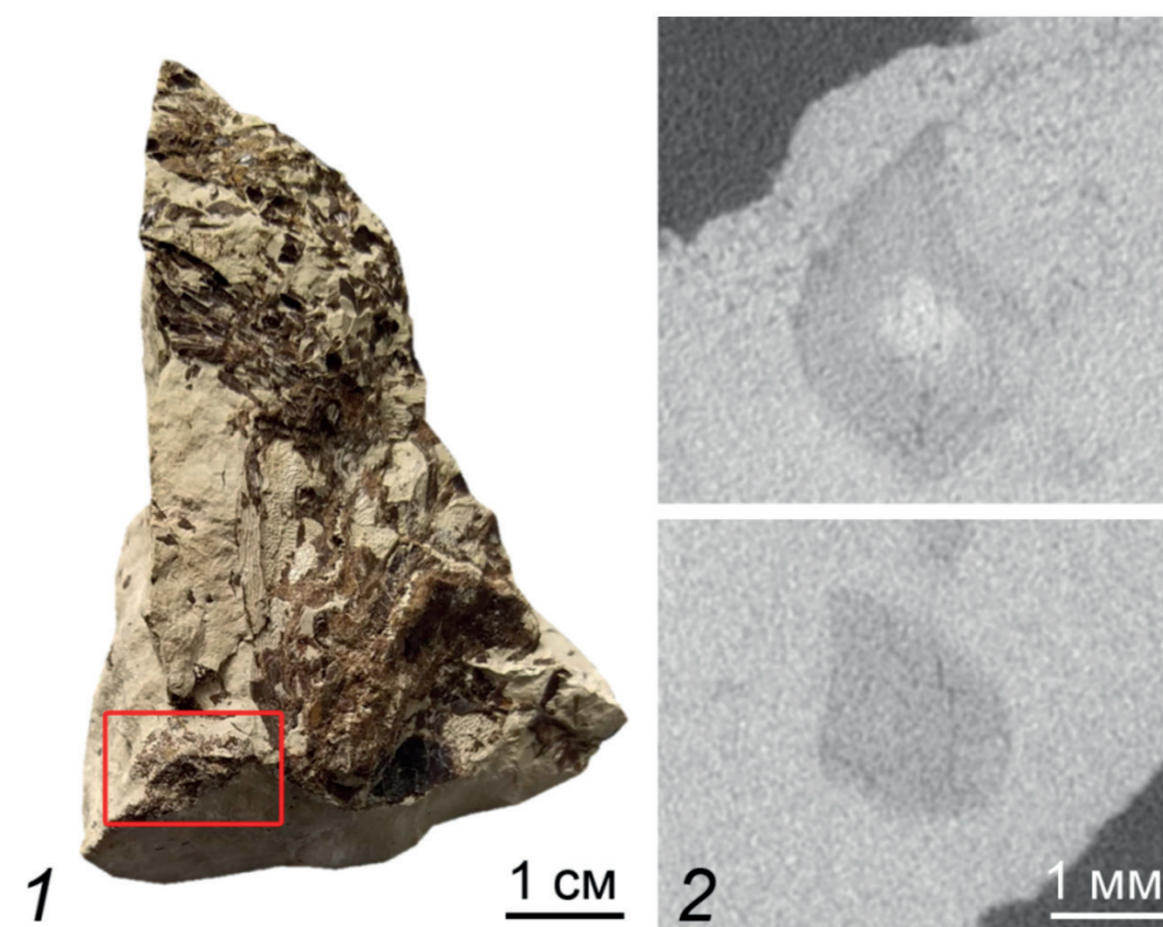


Рисунок 2.35. 1 – фотография породы с фрагментом скелета гибодонтной акулы (средняя пермь, Поволжье), 2 – реконструкция чешуи с системой васкулярных каналов

2.4. Расширение аппаратной базы

Экспериментальный стенд для методических работ с поляризованными нейтронами на реакторе ИР-8

Развитие методов исследования материалов с использованием поляризованных нейтронов представляется крайне актуальным направлением в современной нейтронографии, поскольку позволяет существенно расширить возможности нейтронных методов, предоставляя уникальную информацию о магнитных свойствах и спиновой структуре конденсированных сред. Вместе с тем, до настоящего времени на реакторе ИР-8 исследования с поляризованными нейтронами не проводились. В связи с этим, создание специализированного стенда для методических работ с поляризованными нейтронами на реакторе ИР-8 призвано восполнить этот пробел и открыть новые перспективы для нейтронных исследований. С этой целью на пятом горизонтальном экспериментальном канале (ГЭК-5) был создан экспериментальный стенд, на котором был получен пучок поляризованных нейтронов. Основная задача при создании стенда состояла прежде всего в отработке новых методов исследований, основанных на использовании поляризованных нейтронов, и в обучении кадров для работы на них. В качестве первого реализованного экспериментального метода была выбрана рефлектометрия поляризованных нейтронов, поскольку этот экспериментальный метод относительно несложен и методически подобен методу получения поляризованных пучков путем отражения от намагниченных зеркал.

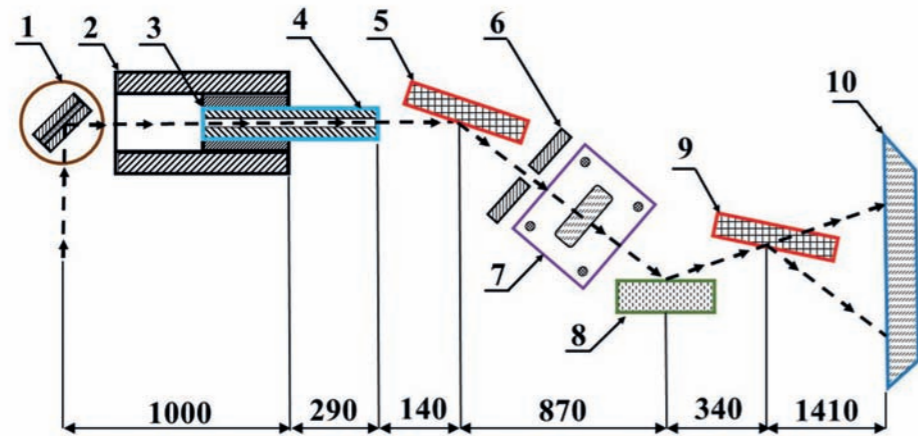


Рисунок 2.36. – Схема стенда нейтронной рефлектометрии: 1 – монохроматор Cu(111); 2 – ГЭК-5; 3 – коллиматор ГЭК-5; 4 – вставка в коллиматор; 5 – суперзеркало поляризатора; 6 – регулируемая щель; 7 – спин-флиппер; 8 – узел образца; 9 – суперзеркало-анализатор; 10 – одномерный позиционно-чувствительный детектор

Общая схема стенда приведена на рисунке 2.36. Стенд работает на фиксированной длине волны $\lambda = 1.524 \text{ \AA}$, получаемой отражением от рабочей плоскости (111) монокристалла меди(I) с мозаичностью 23° . Подобный монохроматор обеспечивает разрешение по длине волны $\frac{d\lambda}{\lambda} = 1\%$. Коллимацию в схеме обеспечивает использование вставки 4 в коллиматор 3, которая имеет размер щели $1 \times 40 \text{ мм}$ и длину 450 мм , и регулируемой щели 6 после узла поляризатора. Щель имеет электроприводы, которые дают

возможность регулировать вертикальные и горизонтальные размеры щели в диапазоне от нуля до 60 мм и от нуля до 40 мм соответственно. Узлы поляризатора 5 и анализатора 9 состоят из постоянных магнитов, внутри которых на платформах линейного перемещения и вращения фирмы Standa устанавливают суперзеркала Fe/Si с отражательной способностью $m = 3,6$. Перемещение суперзеркал поперек пучка нейтронов реализуется с помощью линейных приводов Standa 8MT167-100 (диапазон перемещения 100 мм ; расстояние за 1 шаг – 1 мкм). Вращение суперзеркал обеспечивается осью вращения Standa 8MR190-2-28 (угол поворота 360° , угол поворота за 1 шаг – 0.005°). Управление двигателями осуществляют с помощью контроллеров ONITEX OSM-42ra, подключенных к компьютеру через интерфейс RS485.

Для переворота поляризации относительно ведущего магнитного поля был изготовлен спин-флиппер 7 конструкции Мезея. Детектирование нейтронов осуществляют с помощью одномерного ^3He позиционно-чувствительного детектора 10, изготовленного в НЭОКС ИБР-2 ЛНФ ОИЯИ, который был установлен на расстоянии 1750 мм от образца. Чувствительное окно детектора $200 \times 90 \text{ мм}$, координатное разрешение 1 мм , эффективность детектора $\sim 65\%$, $\lambda = 2 \text{ \AA}$.

В рамках программы тестовых испытаний на созданном стенде были проведены измерения, направленные на определение ключевых характеристик установки и проверку работоспособности основных методик. Первый эксперимент был посвящен измерению степени поляризации нейтронного пучка. Для этого была реализована схема последовательного отражения пучка от двух магнитных суперзеркал с регистрацией интенсивности нейтронов для двух состояний спин-флиппера Мезея – включенного и выключенного. Одновременно с измерением интенсивности поляризованного пучка регистрировался реперный пучок, интенсивность которого не зависела от состояния спин-флиппера, что позволяло учесть возможные флуктуации интенсивности пучка и фоновые эффекты. Экспериментальные данные были получены в виде распределений интенсивностей, аппроксимация которых гауссовыми функциями позволила выделить вклады поляризованного пучка и фоновой составляющей. Расчет степени поляризации, выполненный на основе полученных данных, показал значение $P = 0,94$, что свидетельствует о высокой эффективности разработанной системы поляризации нейтронного пучка.

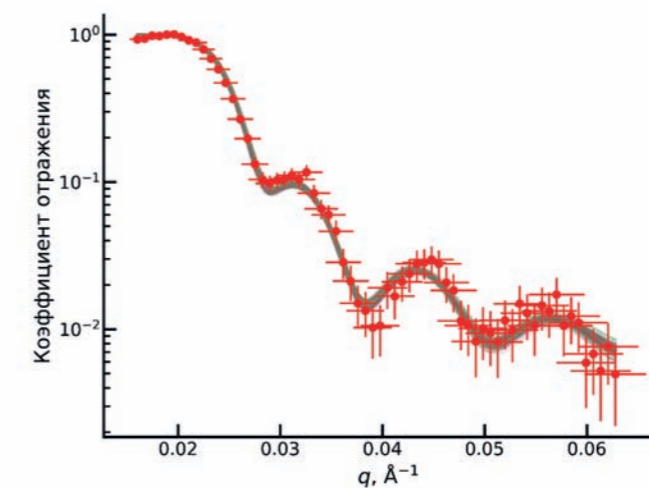


Рисунок 2.37. – Коэффициент отражения нейтронов от пленки Ni/SiO₂: точки – экспериментальные значения коэффициента отражения; линии – результат подгонки с использованием байесовского подхода и моделирования методом Монте-Карло

Второй эксперимент был направлен на проверку работоспособности реализованного на стенде метода нейтронной рефлектометрии. В качестве модельного объекта для рефлектометрических измерений была выбрана тонкая пленка никеля, нанесенная на кремниевую подложку. В ходе эксперимента измерялся коэффициент отражения нейтронов от пленки в зависимости от угла падения излучения, для каждого угла падения проводилось накопление сигнала в течение 120 секунд. Полученная экспериментальная зависимость коэффициента отражения от переданного импульса нейтрона продемонстрировала отчетливо выраженные осцилляции, характерные для тонкопленочных структур. В результате анализа экспериментальных данных была определена толщина слоя никеля и параметры переходных слоев на границах пленки, которые оказались в хорошем согласии с ожидаемыми значениями, основанными на параметрах роста пленки. На рисунке 2.37 представлена кривая коэффициента отражения нейтронов от пленки Ni/SiO₂.

Таким образом на реакторе ИР-8 был создан экспериментальный стенд для работы с поляризованными нейтронами. Разработана схема поляризации монохроматического нейтронного пучка и его анализа с использованием спин-флиппера Мезея. На поляризованном пучке нейтронов на реакторе ИР-8 впервые проведены измерения коэффициентов отражения от магнитных и немагнитных слоев с использованием рефлектометрической схемы. Экспериментальные данные подтверждают возможность применения методов рефлектометрии и радиографии с поляризованными нейтронами на реакторе ИР-8.

Серов Е.О., Савченков П.С., Рогачев А.В., Калюканов А.И., Боднарчук В.И., Белушкин А.В., Экспериментальный стенд для методических работ с поляризованными нейтронами на реакторе ИР-8. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2025, Принята к публикации.

Визуализация структуры микрообъектов с субмикронным разрешением на «КИСИ-Курчатов»

Методы когерентной рентгеновской микроскопии позволяют изучать структуру микро- и наноразмерных рентгенопрозрачных систем, исследование которых с применением стандартной микроскопии поглощения затруднено или невозможно.

Метод фазово-контрастной микроскопии в ближнем поле дифракции выгодно отличается от остальных когерентных методов визуализации микрообъектов благодаря сниженным требованиям к пространственной когерентности пучка СИ, возможности непосредственного наблюдения характерных особенностей исследуемого микрообъекта и детерминированному подходу к решению обратной задачи. Однако при исследовании микрообъектов относительно малого размера (менее 10 мкм) в данном методе возникает проблема, связанная с недостаточным разрешением современных двумерных детекторов для регистрации изображений такого размера. Использование нанофокусирующей рентгеновской оптики для формирования перед исследуемым образцом вторичного источника СИ позволяет преодолеть данную проблему. Расходящийся после вторичного источника пучок СИ обеспечивает геометрическое увеличение изображения при сохранении условия ближнего поля дифракции.

На станции РКФМ синхротрона «КИСИ-Курчатов» впервые экспериментально реализована новая схема фазово-контрастной микроскопии на основе нанофокусирующей составной преломляющей линзы (НСПЛ) из кремния, используемой для формирования вторичного источника синхротронного излучения (СИ). На рисунке 2.38 представлена схема эксперимента.

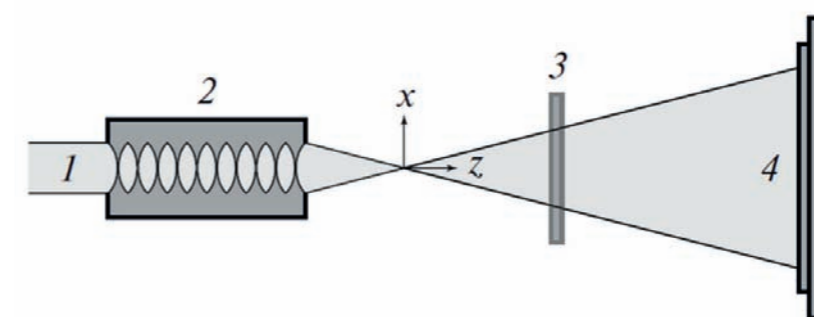


Рисунок 2.38. – Схема фазово-контрастной микроскопии с использованием планарной НСПЛ (1 – монохроматизированный пучок СИ, 2 – НСПЛ, 3 – держатель микрообъекта, 4 – детектор)

Для фокусировки пучка СИ с целью формирования вторичного источника использовали интегральный кремниевый чип с одномерно фокусирующими НСПЛ (апертура = 50 мкм, радиус кривизны параболической поверхности = 6.25 мкм, минимальная толщина = 2 мкм, длина элемента вдоль оптической оси = 102 мкм). В качестве модельного образца использовали линейную зонную пластинку Френеля (ФЗП), изготовленную на мембране из монокристаллического кремния (толщина = 12 мкм, апертура = 387 мкм, разность толщины четных (прозрачных) и нечетных (непрозрачных) зон = 5 мкм, ширина крайней зоны = 0.4 мкм, число зон = 242).

На рисунке 2.39 представлено распределение интенсивности пучка после прохождения крайних зон ФЗП. Наблюдается ярко выраженный контраст, обусловленный разностью фаз волновой функции СИ в областях, соответствующих зонам различной толщины.

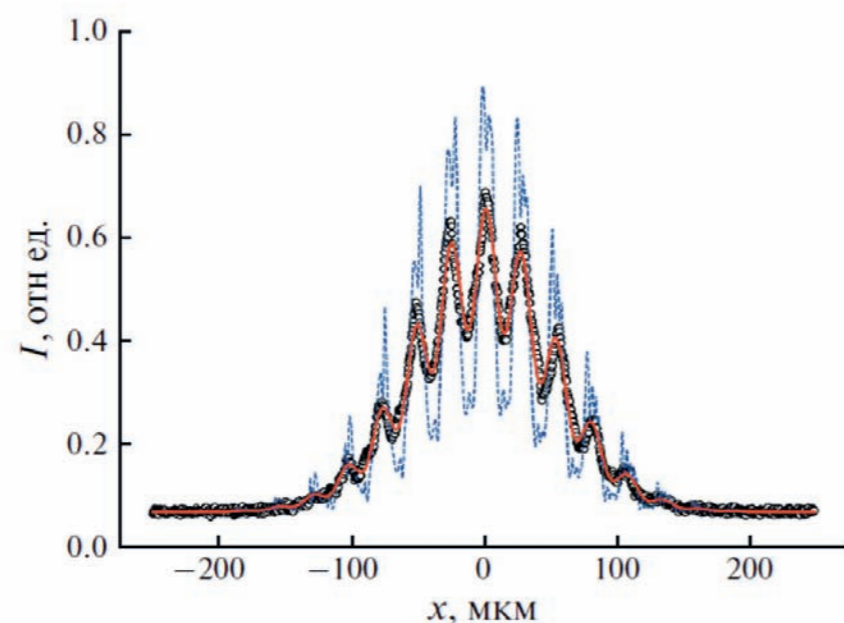


Рисунок 2.39. – Фазовый контраст обусловленный структурой ФЗП. Точки эксперимент, сплошная линия – моделирование, прерывистая – расчет для точечного источника

Визуализация структуры крайних зон ФЗП демонстрирует достижение субмикронного пространственного разрешения. Экспериментально измеренный период зон ФЗП составил 0.98 ± 0.02 мкм (ширина 0.49 мкм), что соответствует реальному периоду в области освещения ФЗП пучком СИ. Сравнение модельных кривых фазового контраста с экспериментальными данными показало, что основной причиной ухудшения пространственного разрешения является вибрация элементов оптической схемы, а не частичная пространственная когерентность пучка СИ. При исключении данного фактора и использовании когерентного пучка СИ предложенная в настоящей работе схема теоретически позволяет визуализировать структуру микрообъектов с разрешением менее 100 нм.

М.С. Фоломешкин, В.Г. Кон, А.Ю. Серёгин, Ю.А. Волковский, П.А. Просеков, В.А. Юнкин, А.А. Снигирёв, Ю.В. Писаревский, А.Е. Благов, М.В. Ковальчук. // Кристаллография. – 2024. – Т. 69. – № 6. – С. 919-926.

Модернизация системы обратной связи экспериментальной станции НаноФЭС

Источником излучения экспериментальной станции НаноФЭС синхротрона «КИСИ-Курчатов» является пучок релятивистских электронов с энергией 2,5 ГэВ, осуществляющих поворот в магнитном поле поворотного магнита синхротрона «КИСИ-Курчатов». Пространственное положение данного пучка электронов и его временная стабильность напрямую сказывается на результатах исследований на синхротронной станции. Так, отклонение пучка электронов по горизонтали приводит к изменению интенсивности фотоэлектронного сигнала, а отклонение по вертикали – к изменению энергии фотонов после монохроматора. Таким образом, проведение работ, направленных на увеличение стабильности положения пучка синхротронного излучения (СИ) является актуальной задачей для увеличения разрешающей способности экспериментальных методов синхротронной станции.

На станции НаноФЭС была разработана система сбора и анализа сигналов с 4-х ножевого датчика положения пучка, окно с ножевыми электродами которого показано на рисунке 2.40.

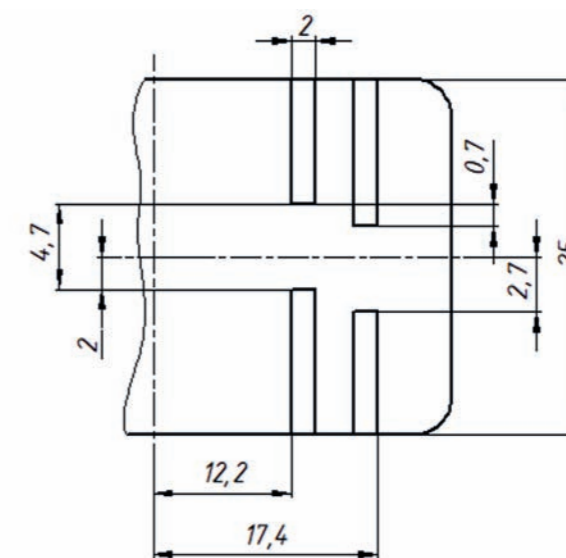


Рисунок 2.40. – Геометрия ножей-электродов датчика положения пучка

Геометрические размеры ножей-электродов монитора положения пучка были использованы для проведения расчетов смещения фотонного пучка и чувствительности монитора. Безразмерный сигнал с ножей, пропорциональный смещению фотонного пучка, был рассчитан по формуле:

$$P = \frac{\sum I_T - \sum I_B}{\sum I_T + \sum I_B} = \frac{\sum \Phi_T - \sum \Phi_B}{\sum \Phi_T + \sum \Phi_B}, \quad (3)$$

где I_T и Φ_T - ток и поток фотонов на верхних электродах, а I_B и Φ_B - ток и поток фотонов на нижних электродах. А значение чувствительности $S = \frac{dP(\Delta)}{d\Delta}$ при $\Delta=0$ было рассчитано равным $S=0,523$ мм⁻¹.

Полученные параметры были использованы для написания программного кода на языке программирования Python. Данный код собирает сигнал с монитора положения пучка, рассчитывает текущее отклонение фотонного пучка от равновесного положения и передает сведения для внесения коррекции в токи корректирующих магнитов синхротрона. Кроме того, в систему управления монохроматором синхротронной экспериментальной станции был внедрен программный код, позволяющий отслеживать статус открытия фотонного пучка накопителя, что позволило автоматизировать процесс измерения фотоэлектронных спектров и обработки сигналов с монитора положения пучка.

Таким образом, на синхротронной экспериментальной станции НаноФЭС была проведена модернизация системы обратной связи с источником синхротронного излучения. Данная система позволяет регистрировать отклонение пучка СИ от равновесной орбиты и вносить изменения в токи корректирующих магнитов синхротрона, а также синхронизировать работу детектирующих систем станции с доступностью фотонного пучка. Проведенная работа позволила существенно автоматизировать процесс измерения, что увеличило эффективное время работы станции.

Разработка экспериментальной процедуры по методу трёхмерных стоячих рентгеновских волн для исследования морфологии и химического состава поверхностей современных структур со сложной непланарной архитектурой на Курчатовском источнике синхротронного излучения

Целью настоящей работы является разработка и адаптация метода трёхмерных стоячих рентгеновских волн (3D XSW) для анализа морфологии и химического состава наноструктур. Это включает исследование возможностей метода для восстановления пространственных параметров и профилей элементов сложных структур с латеральной периодичностью.

С развитием микроэлектроники возрастает потребность в высокоточных методах анализа сложных структур, используемых в полупроводниковой промышленности и других областях нанотехнологии. Метод 3D XSW отличается высокой чувствительностью, неразрушающим характером и возможностью использования на лабораторных установках, что делает его перспективным для научных исследований и потенциально даже для промышленных применений. Актуальность исследования обусловлена необходимостью повышения точности измерений и расширения возможностей существующих экспериментальных методик.

В ходе исследовательских работ было разработано новое программное обеспечение для расчёта карт флуоресценции, модулированной трёхмерными стоячими волнами, на основе динамической теории дифракции в многоволновом приближении. Эта теория, аналогична точному Фурье модальному методу (FMM), основана на разложении решения волнового уравнения согласно теореме Блоха, что гарантирует высокую точность описания сложных структур с латеральной периодичностью и обеспечивает численную эффективность расчёта. Динамическая теория позволяет учитывать многоволновые эффекты, которые модулируют вторичное излучение в наноструктурах латеральной периодичностью. Таким образом, анализируя модуляцию интенсивности флуоресценции можно поэлементно восстановить трёхмерные распределения концентрации в наноструктуре. Для анализа экспериментальных данных 3D CPB был разработан алгоритм, написанный и оптимизированный в окружении Python, что обеспечивает удовлетворительную производительность и удобство в использовании. Такой подход позволяет обходиться без дорогостоящих вычислений на суперкомпьютерах, что особенно важно при разработке инструментов для лабораторных экспериментов. Программное обеспечение позволяет быстро моделировать карты рентгеновской флуоресценции на основе параметров, заданных для исследуемого образца. На рисунке 2.41 представлено восстановление тестовой структуры методом 3D CPB.

Характерным элементом карт флуоресценции модулированной стоячими волнами являются резонансные линии. Они формируются за счёт дифракции эванесцентных волн. Исходя из этих соображений, нами были получены простые выражения для расчёта позиций эти резонансных

линий:

$$\sin \alpha_m = \sqrt{\Gamma_m^2 - 2\Gamma_m \sin \phi - \chi_e}, \quad (7)$$

где m – порядок резонансной линии, $\Gamma = m\lambda/D$ – параметр, связанный с длиной волны λ и периодом структуры D , ϕ – азимутальный угол, χ_e – эффективная диэлектрическая восприимчивость. Обратим внимание, что это выражение зависит от хорошо контролируемых параметров установки. Таким образом, эти линии позволяют проводить калибровку системы и предварительно оценивать параметры структуры с высокой точностью, что подтверждено экспериментальными данными и численным моделированием. В работе также выведены эмпирические формулы для предсказания критических азимутов отражения и дифракции, которые подтверждены через точные расчёты и экспериментальные измерения. Основываясь на численных расчётах, была разработана экспериментальная схема для проведения измерений 3D CPB на синхротронном источнике. Экспериментальная схема была апробирована при помощи измерения карт флуоресценции (зависимость интенсивности характеристической линии от азимутальной ориентации и угла падения) на тестовом образце с критической размерностью 16 нм. Измерения проведены на синхротроне «КИСИ-Курчатов». Образец представлял собой наноразмерный периодический массив из столбиков TiN с периодичностью 32 нм, изготовленную с использованием современных методов литографии. Измерения проводились с использованием монохроматического рентгеновского излучения с энергией 13 кэВ. Установка обеспечивала возможность регулировки углов падения и азимута, что позволило провести детальное сканирование параметров структуры. Флуоресцентный сигнал регистрировался с использованием энергодисперсионного SSD детектора VORTEX X90, что позволило достигнуть высокой чувствительности при измерениях. Полученные карты интенсивности сигнала позволили детализировать пространственное распределение элементов в структуре и выявить её тонкие особенности, такие как наличие остаточного оксида на стенках линий и неровности в профиле решетки. Получены флуоресцентные карты, позволяющие восстановить элементный профиль структуры.

Проведён сравнительный анализ результатов, полученных методом 3D CPB с данными трансмиссионной электронной микроскопии (ТЭМ). Данные ТЭМ позволили получить подробный профиль структуры, включая наклон стенок линий, наличие остатков оксида на боковых поверхностях и неравномерности в основании.

Однако, в отличие от TEM, метод 3D XSW обеспечивает средние значения параметров для больших участков образца, что особенно важно для анализа промышленно значимых структур. При этом результаты, полученные методом 3D CPB, продемонстрировали высокую согласованность с измерениями ТЭМ. Например, критическая размерность структуры, определенная методами, отличалась менее чем на 2%, а параметры высоты и ширины линий находились в пределах доверительных интервалов всех методов. Это подтверждает пригодность метода 3D XSW для анализа сложных структур с минимальными требованиями к подготовке образцов.

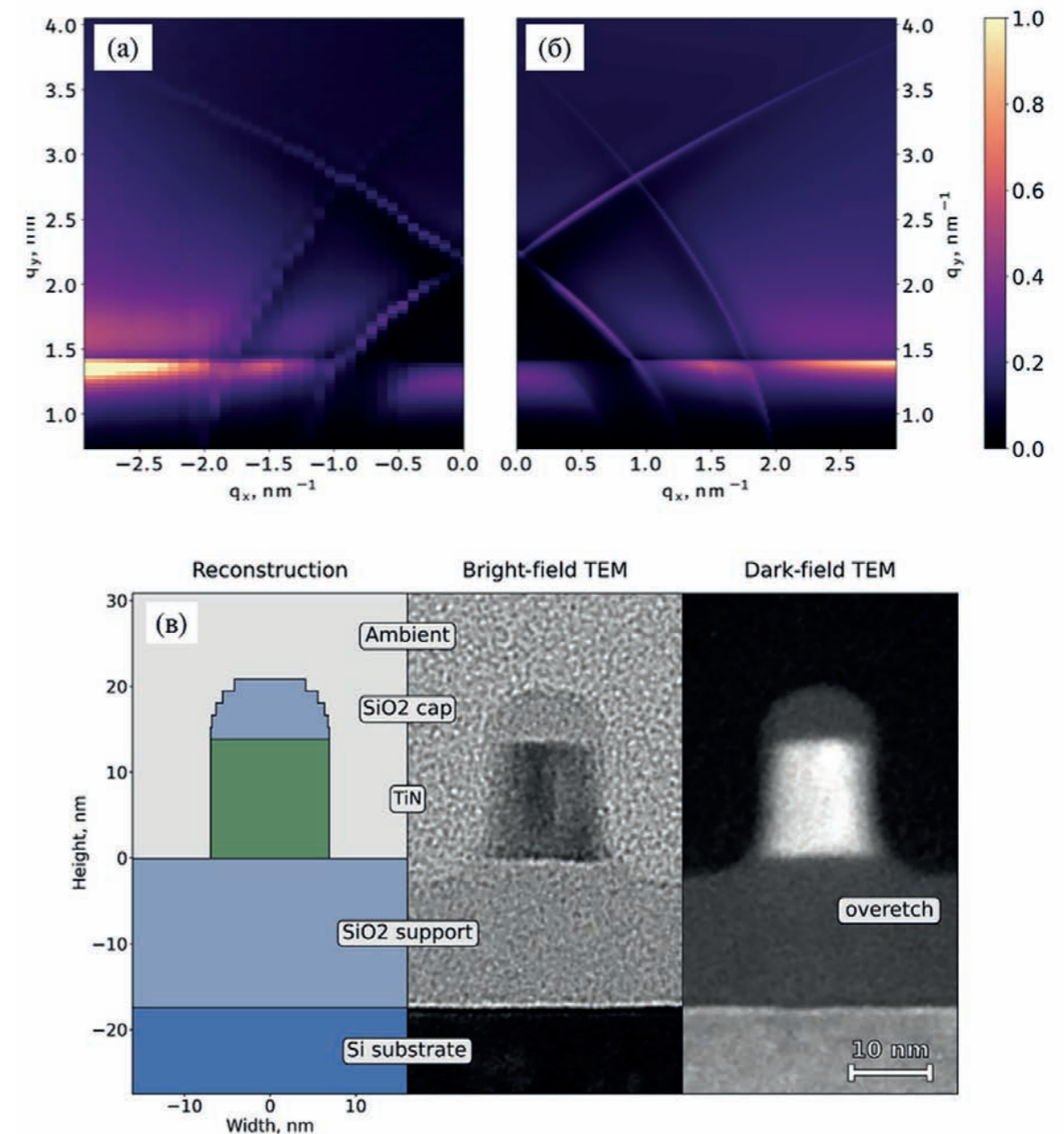


Рисунок 2.41. – Восстановление тестовой структуры методом 3D CPB. (а) Экспериментальная карта флуоресценции характеристической линии Ti. (б) Теоретически рассчитанная карта флуоресценции. (в) Сравнение восстановления распределения Ti (обозначено зелёным цветом) с данными ТЭМ

Продемонстрирована возможность выделения ключевых параметров структуры, включая высоту, ширину и концентрацию элементов, с точностью, отвечающей требованиям современной микроэлектроники. Эти результаты открывают перспективы дальнейшего применения метода 3D XSW как в научных исследованиях, так и в микроэлектронной промышленности. Метод позволяет не только определять пространственные параметры сложных структур, но и выявлять скрытые особенности, такие как остаточные слои материалов или вариации в составе. Важным преимуществом является его адаптируемость к раз-

личным экспериментальным условиям и возможность масштабирования для анализа больших объёмов данных. В дальнейшем планируется интеграция метода с другими аналитическими техниками для расширения его функциональности, а также адаптация к анализу мягкого рентгеновского диапазона, что позволит исследовать структуры с ещё большей детализацией.



Глава 3 **Проекты, поддержанные** **Российским научным фондом**

Глава 3

ПРОЕКТЫ, ПОДДЕРЖАННЫЕ РОССИЙСКИМ НАУЧНЫМ ФОНДОМ.....	83
Договоры в рамках Соглашений с РНФ 2023-2025 гг. (продление конкурса 2019).....	86
Договоры в рамках Соглашений с РНФ 2021-2024 гг.....	96
Договоры в рамках Соглашений с РНФ 2023-2026 гг.....	116

23

исследовательских
проекта



Российский
научный
фонд

Исследования в рамках грантов Российского научного фонда по мероприятию «Проведение исследований на базе существующей научной инфраструктуры мирового уровня» Президентской программы исследовательских проектов, реализуемых ведущими учеными, в том числе молодыми учеными

Источник синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» неоднократно подтверждал свой статус установки класса «мегасайенс», участвуя в конкурсах на получение грантов Российского научного фонда (РНФ) в рамках мероприятия «Проведение исследований на базе существующей научной инфраструктуры мирового уровня». Эти гранты направлены на поддержку фундаментальных и поисковых научных исследований, а также на реализацию научно-технических программ и проектов с использованием уникальных исследовательских комплексов.

Трижды «КИСИ-Курчатов» становился самой востребованной установкой среди научных коллективов, привлекая максимальное количество заявок от исследователей. Это свидетельствует о высокой значимости инфраструктуры для российской и мировой науки.

На сегодняшний день в Курчатовском комплексе синхротронных и нейтронных исследований (ККСНИ) в рамках выделенных грантов РНФ успешно реализуется 23 проекта, охватывающих широкий спектр актуальных направлений.

Далее представлены аннотации исследовательских проектов, выполняемых при поддержке РНФ.

Договоры в рамках Соглашений с РФФ 2023-2025 гг. (продление конкурса 2019)

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

Головная организация: Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, г. Москва

Руководитель: Чвалун Сергей Николаевич, доктор химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Проект направлен на синтез и комплексное изучение свойств карбосилановых и олиготиофенсилановых дендримеров и монодендронов – нового класса функциональных макромолекул. В ходе выполнения проекта будут получены карбосилановые и олиготиофенсилановые монодендроны и дендримеры, будут изучены их фазовое поведение, супрамолекулярная организация и фотофизические свойства. Сравнение супрамолекулярной организации дендритных макромолекул, полученных принципиально разными способами, позволит выявить влияние их химической структуры и типа связи на физико-химические характеристики. Решение поставленной задачи приведет к пониманию фундаментальной взаимосвязи между химическим строением (в частности, длиной олиготиофеновых, карбосилановых фрагментов, соотношением между ними и их взаимным расположением в структуре дендримеров) и свойствами таких макромолекул, что позволит предсказывать свойства такого класса соединений и получать новые функциональные материалы с заранее заданными свойствами для потенциального применения в органической и молекулярной электронике будущего.

Ожидаемые результаты

В рамках проекта будет решена комплексная задача создания самоорганизующихся материалов и изделий – двумерных тонкопленочных приборов для оптической электроники и фотовольтаики с управляемой структурой. Для этого будет проведен сравнительный анализ структуры, свойств и фазового поведения сопряженных линейных и дендритных соединений, а также карбосилановых рядов дендримеров в широком интервале генераций с периферией различной химической структуры. Кроме того, будет решен технологический аспект поставленной проблемы – использование и адаптация процессов самосборки и самоорганизации поверхностно-активных сопряженных органических соединений для создания планарных монослойных органических светоизлучающих диодов, транзисторов и фотовольтаических элементов. В последние годы придается большое значение поиску и дизайну новых сопряженных органических структур, обладающих высокой подвижностью носителей зарядов, проводимостью, высокой эффективностью люминесценции, хорошей перерабатываемостью из растворов и другими свойствами, необходимыми для

создания более эффективных материалов и технологий для органической оптоэлектроники. Анализ фазового поведения карбосилановых дендримеров – монодисперсных макромолекул различных генераций с различной природой и числом концевых групп позволит установить общие фундаментальные закономерности организации систем низкой размерности. Поэтому ожидаемые результаты представляют существенную ценность для современной науки. Их уровень будет не ниже мирового, а в некоторых аспектах даже превосходить его.

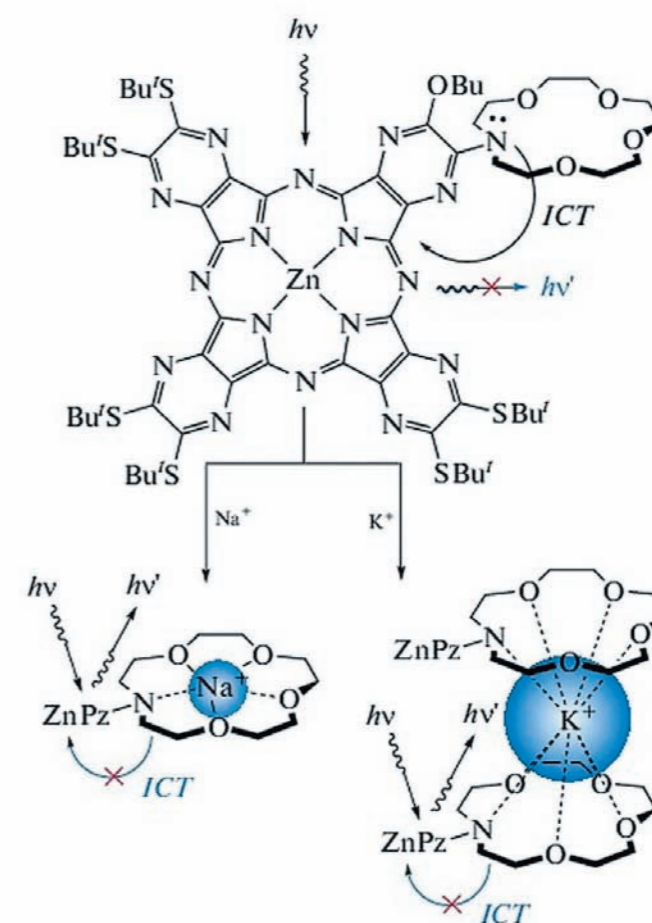


Рисунок 3.1. – Аза-краун-фталочиаиновый флуоресцентный сенсор для катионов щелочных металлов и схематическое изображение связывания Na⁺ и K⁺, приводящего к усилению флуоресценции

Публикации по теме работы

Александрова А. В. и др. Управление структурой и рецепторными характеристиками монослоев краун-замещенных гемецианиновых хромоинофоров на жидких и твердых подложках // IX Международная конференция по физической химии краун-соединений, порфиринов и фталочиаинов. – 2022. – С. 25-25.

Stupnikov A. A. et al. The effect of aliphatic chain length on the self-assembly of wedge-shaped cesium 3, 4, 5-tris (alkyloxy) benzenesulfonates // Molecular Systems Design & Engineering. – 2023. – Т. 8. – № 2. – P. 181-188.

Соединения включения на основе пористых металлоорганических каркасов: структура, реакционная способность и функциональные свойства

Головная организация: Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения РАН, Новосибирская область

Руководитель: Федин Владимир Петрович, доктор химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Фундаментальной научной проблемой, на решение которой направлен проект, является создание научных основ структурной химии соединений включения на основе металлоорганических координационных полимеров (МОКП) с целью разработки нового поколения нанопористых высокоэффективных и высокоселективных сорбентов, а также для установления потенциала пористых МОКП для стабилизации неустойчивых молекул (частиц).

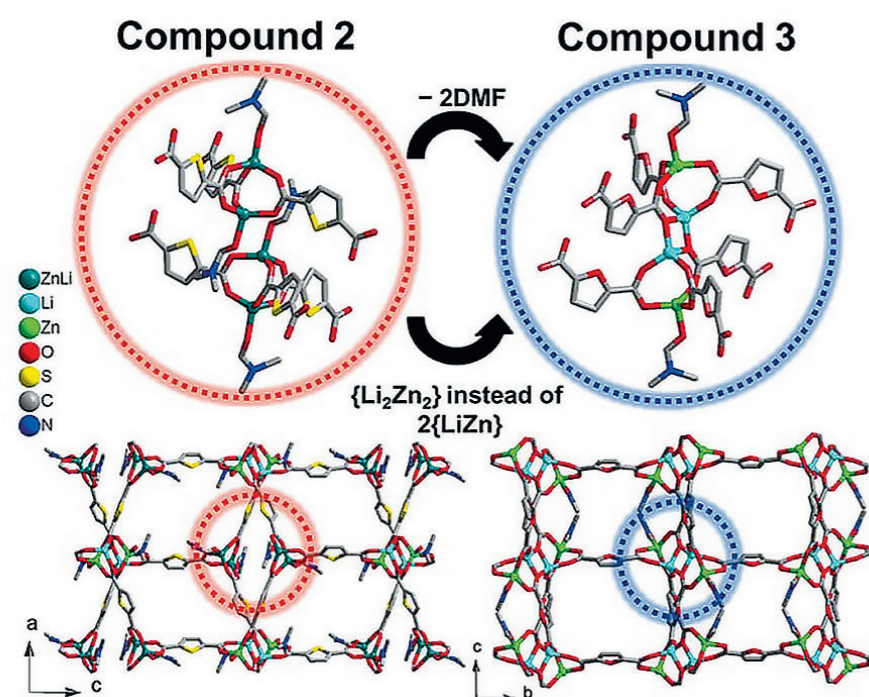


Рисунок 3.2. – Модели новых структур МОКП, полученные методом монокристаллической дифракции на синхротроне «КИСИ-Курчатов»

Рентгеноструктурный анализ с использованием синхротронного излучения позволит получить детальную информацию о структурно-динамических аспектах, напрямую связанных с формированием функциональных свойств. На основе полученных экспериментальных данных будут предложены механизмы взаимодействия гостевых молекул с пористыми матрицами и предложены пути целенаправленного получения и (или) улучшения функциональных свойств материалов. Кроме этого, контролируя размер и форму полостей можно добиться селективного протекания реакций с образованием уникальных продуктов, которые

трудно или невозможно получить в других условиях. Успешное выполнение проекта позволит перейти от фундаментальной химии к материаловедению и дальнейшей разработке новых функциональных материалов для хранения газов, разделения сложных смесей, для задач, связанных с защитой окружающей среды.

Публикации по теме работы

Cheplakova A. M. Et al. Synthesis, supramolecular isomerism, and photoluminescence of scandium (III) complexes with a tetrafluoroterephthalate ligand // CrystEngComm. – 2022. – T. 24. – № 11. – P. 2057-2071.

Pavlov D. I. et al. A luminescent 2, 1, 3-benzoxadiazole-decorated zirconium-organicframework as an exceptionally sensitive turn-on sensor for ammonia and aliphatic amines in water // Journal of Materials Chemistry C. – 2022. – T. 10. – № 14. – P. 5567-5575.

Pavlov D. I. et al. Synthesis and crystal structure of a luminescent metal-organic framework based on 4, 7-(4-carboxyphenyl)-2, 1, 3-benzoxadiazole // Russian Chemical Bulletin. – 2022. – T. 71. – № 5. – P. 974-979.

Актиниды в объектах ядерного наследия

Головная организация: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва

Руководитель: Власова Ирина Энгельсовна, кандидат химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

В Российской Федерации в настоящее время реализуется государственная программа «Развитие атомного энергопромышленного комплекса», направленная, в первую очередь, на расширение мощностей электрогенерации атомных электростанций. Одной из задач этой Программы является работа с объектами ядерного наследия. Эти объекты включают в себя поверхностные бассейны с жидкими отходами, пульпохранилища, полигоны испытания ядерного оружия, территории выбросов при авариях на предприятиях ядерно-топливного цикла, подземные выработки, загрязненные здания. Объекты ядерного наследия подлежат реабилитации либо путем удаления отходов в специальные хранилища, либо безопасным захоронением на месте. В первую очередь должна быть решена задача установления форм радионуклидов в объекте с целью построения прогнозной модели распространения актинидов от источника загрязнения, а также для выбора оптимальных путей безопасного и эффективного кондиционирования отходов и реабилитации территории. При исследовании миграционного поведения актинидов в условиях каждого объекта предполагается особый акцент сделать на оценке доли миграции актинидов в коллоидной форме, как в существующих геохимических условиях среды, так и при их возможных изменениях.

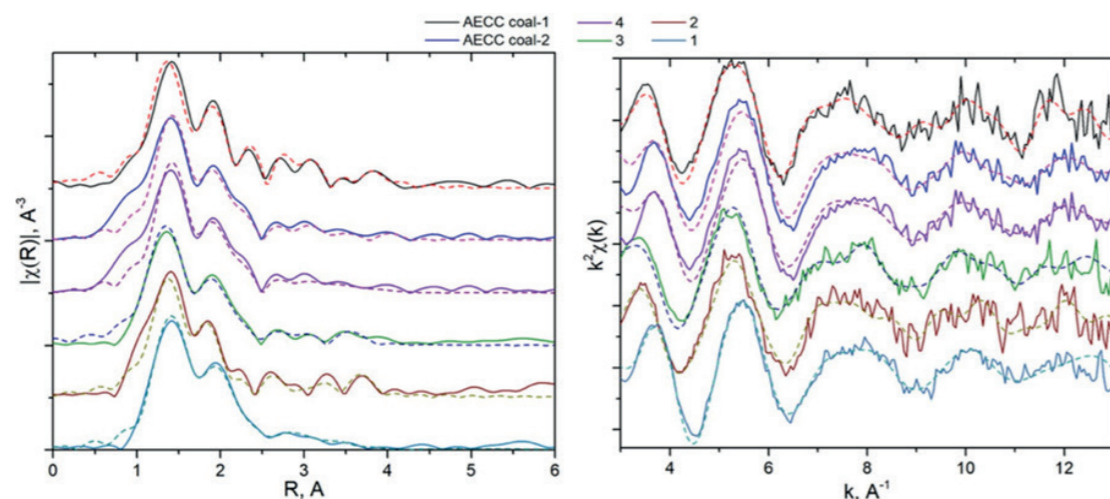


Рисунок 3.3. – Сравнение спектров EXAFS урана на угле с территории АЭХК (г. Ангарск) и образцов, приготовленных в лабораторных условиях при разных значениях pH

Для установления форм актинидов существует большой комплекс современных аналитических методов, среди которых особое место занимают методы, основанные на использовании синхротронного излучения. Для выполнения цели и задач проекта будут использованы возможности «КИСИ-Курчатов» для определения валентных состояний актинидов, локального окружения атомов актинидов, определения структуры и состава фаз-носителей актинидов и построения 3D карт плотности актинидосодержащих материалов. По-

мимо методов, основанных на синхротронном излучении, при выполнении проекта будут использованы современные методы цифровой радиографии, альфатрековой радиографии, вибрационной спектроскопии с микронным разрешением, электронной микроскопии (просвечивающая электронная микроскопия с высоким разрешением, растровая электронная микроскопия), а также методы последовательного выщелачивания.

В ходе выполнения проекта планируется получить сведения о формах актинидов в различных геохимических обстановках и средах, входящих в состав реальных объектов ядерного наследия, в том числе во временных хранилищах радиоактивных отходов; в воде, донных осадках, взвешенном / коллоидном веществе и биоте поверхностных водоемов – хранилищ ЖРО; в грунтовых водах, прилегающих к источникам радиоактивного загрязнения, пласте-коллекторе ЖРО, местах испытания ядерного оружия и на территориях, подвергшихся аварийным выбросам. Ожидается получить результаты, выполненные на современном аналитическом уровне, что позволит в дальнейшем провести эффективную и безопасную реабилитацию загрязненных территорий. Полученные сведения позволят улучшить экологическую обстановку в отдельных исторически загрязненных районах РФ, и тем самым приведут к росту доверия общественности к безопасности и надежности ядерной энергетики.

Публикации по теме работы

Pavlov D. I. et al. Synthesis and crystal structure of a luminescent metal-organic framework based on 4,7-[4-carboxyphenyl]-2,1,3-benzoxadiazole // *Russian Chemical Bulletin*. – 2022. – Т. 71. – № 5. – P. 974-979.

Германова А. В. и др. Формы нахождения урана в грунте на территории сублиматного производства АО «АЭХК» // *Радиохимия*. – 2021. – Т. 63. – № 1. – С. 93-100.

Vlasova I. E. et al. Nuclear Melt Glass from Experimental Field, Semipalatinsk Test Site // *Energies*. – 2022. – Т. 15. – № 23. – P. 9121.

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

Головная организация: Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, г. Москва

Руководитель: Логинов Дмитрий Александрович, доктор химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Разработка селективных каталитических процессов является важнейшей областью современной химии. Они позволяют осуществлять направленное создание веществ с заданными свойствами. Существующие подходы к созданию химических связей подчас обладают недостаточной селективностью либо экономичностью. Разработка новых подходов часто осложняется трудностью изучения механизмов каталитических реакций и потребностью в дорогостоящем уникальном оборудовании.

Коллективом авторов данного проекта ранее был предложен новый селективный подход к каталитическим реакциям восстановительного присоединения.

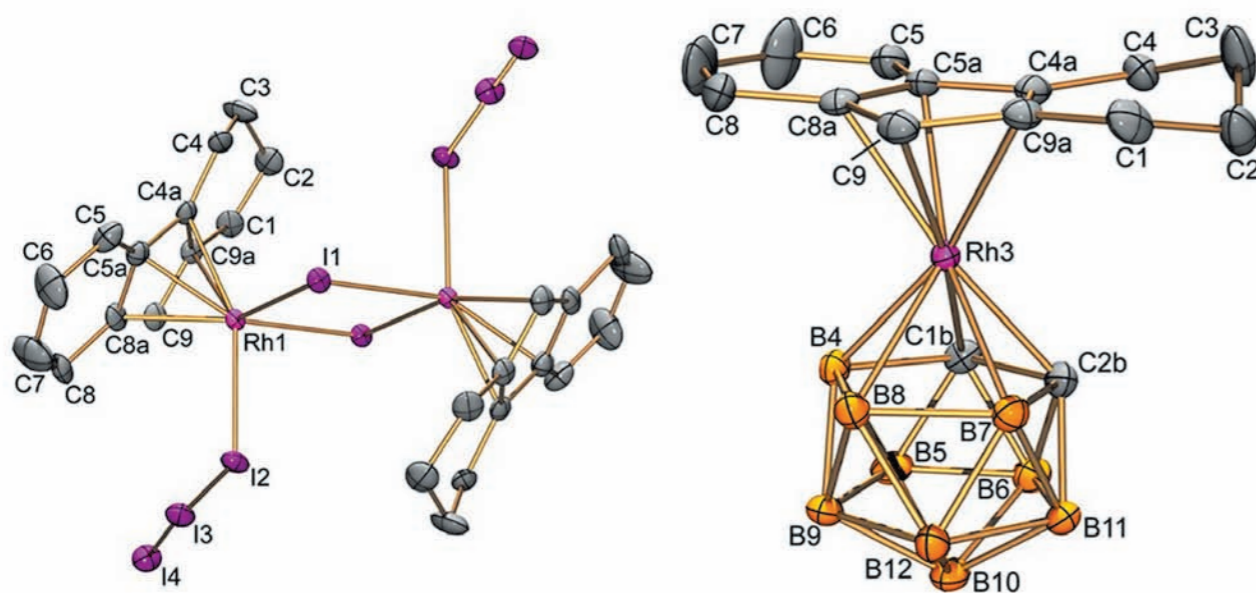


Рисунок 3.4. – Модели новых родиевых комплексов, полученных в рамках проекта

Селективность процесса достигается за счет направленного подбора катализатора и выбора подходящего восстановителя. В качестве восстановителя использовался угарный газ, который зарекомендовал себя как один из самых селективных восстановителей для органических процессов. Угарный газ возможно эффективно получать, используя газовые смеси, содержащие монооксид углерода. Использование таких смесей осложняется наличием примесей, которые могут деактивировать катализаторы, необходимые для осуществления селективных восстановительных процессов. Такую задачу можно решить, изучив зависи-

мость структуры и свойств разных каталитических систем. Понимание того, какие примеси могут связываться с каталитически активными частицами разного типа, позволит определить способ модификации катализатора, который устраняет эту проблему. В результате выполнения проекта будут открыты новые пути синтеза ценных органических соединений, например, органокатализаторов, фунгицидов и других препаратов, необходимых для сельского хозяйства. Вместе с этим будет предложено решение проблемы прямой утилизации газовых смесей, содержащих угарный газ (например, конвертерный газ).

Публикации по теме работы

Podyacheva E. et al. Syngas Instead of Hydrogen Gas as a Reducing Agent-A Strategy To Improve the Selectivity and Efficiency of Organometallic Catalysts // ACS catalysis. - 2022. - T. 12. - №9. - P. 5145-5154.

Kharitonov V. B., Muratov D. V., Loginov D. A. Cyclopentadienyl complexes of group 9 metals in the total synthesis of natural products // Coordination Chemistry Reviews. - 2022. - T. 471. - P. 214744.

Kharitonov V. B. et al. Easy Access to Versatile Catalytic Systems for C- H Activation and Reductive Amination Based on Tetrahydrofluorenyl Rhodium (III) Complexes // Chemistry-A European Journal. - 2021. - T. 27. - №42. - P. 10903-10912.

Новые подходы к конструированию кристаллических материалов: супрамолекулярные клетки на основе металлокластеров каликс[4]аренов

Головная организация: Казанский (Приволжский) федеральный университет, Республика Татарстан

Руководитель: Соловьева Светлана Евгеньевна, доктор химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Наноразмерные металлокластеры и клетки, содержащие от 2-х до сотен ионов, обладают уникальными физико-химическими свойствами, которые их существенно отличают от свободных ионов и твердых тел. Их уникальные электронные, магнитные и химические свойства могут регулироваться путём изменения морфологического состава, структуры, а также координационного окружения и пространственного расположения взаимодействующих катионов d и f-металлов. В этом контексте супрамолекулярные взаимодействия, управляющие процессами самоагрегации молекулярных динамических систем, являются одним из удобных и подходящих инструментов для решения проблем дизайна новых кристаллических материалов. Уникальная способность каликс[4]ареновой платформы образовывать гомо- и гетероядерные кластерные комплексы с катионами d и f элементов в кристаллической фазе позволяет рассматривать её в качестве перспективного строительного молекулярного блока для дизайна новых полиядерных супрамолекулярных структур на принципе «снизу-вверх» с целью создания функциональных материалов.

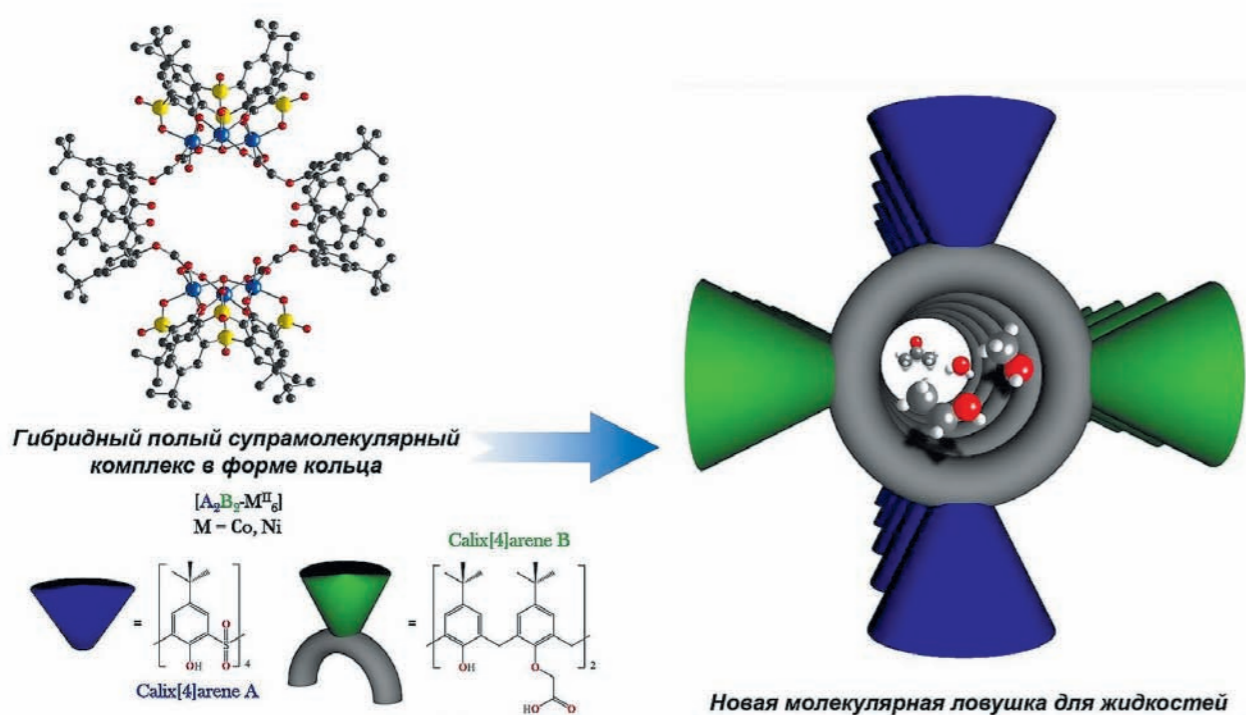


Рисунок 3.5. – Пористые шестиядерные кольцеобразные кластеры никеля и кобальта, построенные из двух разных видов каликсареновых лигандов - новые молекулярные ловушки для небольших летучих молекул

Применение рационального подхода в функционализации каликсаренов, а также других солигандов, используемых в комбинации с ними, способно усилить их кластерообразующую способность, и, таким образом, привести к тонкой подстройке заданных свойств полученного материала на молекулярном уровне. Основным результатом выполнения данного проекта будет являться создание серии новых включающих каликс[4]арены кристаллических структур на основе металлокластеров и клеток, способных проявлять функциональные свойства, а именно, магнитные (включая мономолекулярные магнетики) и молекулярных контейнеров (супрамолекулярные клетки).

Публикации по теме работы

Kniazeva M. V. et al. Crystalline Assembly and Solvent-induced Solid-state Transformation of 1D Zigzag Chains Based on Sulfonylcalix [4] arene Trinuclear Co (II) and Zn (II) Clusters // European Journal of Inorganic Chemistry. - 2022. - T. 2022. - № 32. - P. e202200464.

Kniazeva M. V. et al. Porous nickel and cobalt hexanuclear ring-like clusters built from two different kind of calixarene ligands-new molecular traps for small Vatile molecules // CrystEngComm. - 2022. - T. 24. - № 2. - P. 330-340.

Kniazeva M. V. et al. Impact of flexible succinate connectors on the formation of tetrasulfonylcalix [4] arene based nano-sized polynuclear cages: structural diversity and induced chirality study // CrystEngComm. - 2022. - T. 24. - № 3. - P. 628-638.

Договоры в рамках Соглашений с РФ 2021-2024 гг.

Упругое и неупругое рассеяние рентгеновского излучения на наноструктурированных неоднородностях пленок и «инженерия» интерфейсов в многослойных рентгеновских зеркалах

Головная организация: Институт прикладной физики РАН, Нижегородская область

Руководитель: Чхало Николай Иванович, доктор физико-математических наук

Область знания: Физика и науки о космосе

Аннотация

Многослойные интерференционные структуры (МИС) для экстремального ультрафиолетового (ЭУФ) и мягкого рентгеновского излучения широко используются при решении различных спектроскопических задач. В частности, они стали основным инструментом при решении задач нанолитографии по передовым технологическим нормам. Многослойные зеркала широко используются в рентгенофлуоресцентном анализе легких элементов. Современные рентгеновские дифрактометры в обязательном порядке оснащены параболическим/эллиптическими многослойными зеркалами для коллимации и фокусировки рентгеновского излучения. Широко используются многослойные зеркала и в синхротронных исследованиях, обеспечивая коллимацию и фокусировку рентгеновского излучения, подавление высоких гармоник ондуляторов.

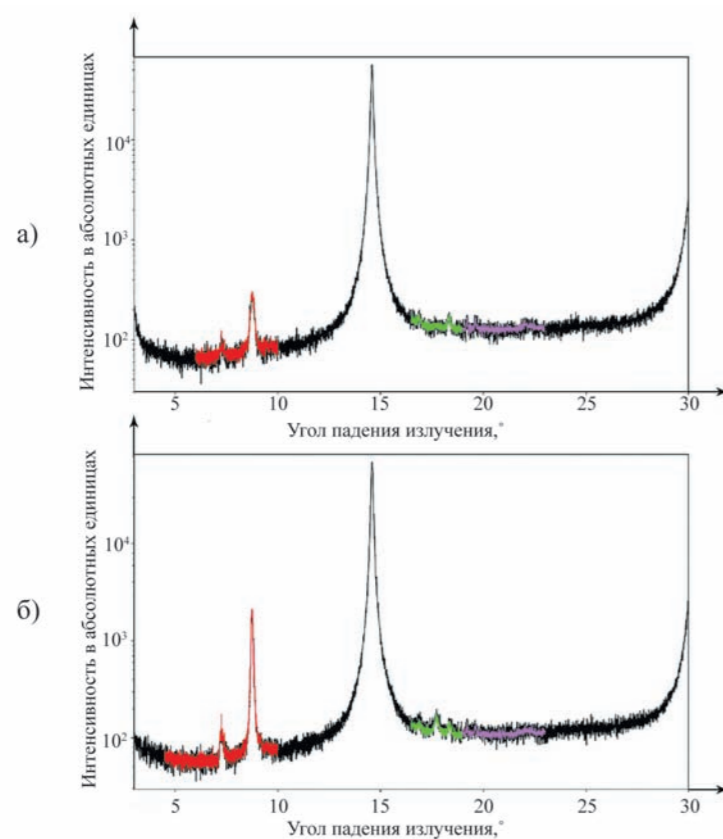


Рисунок 3.6. – Зависимость интенсивности сигнала от угла падения на образец: а) для образца с толщиной слоя Мо 10 нм, б) для образца с толщиной слоя Мо 50 нм

Наблюдаемые на практике потери коэффициентов отражения МИС в ЭУФ диапазоне не могут быть объяснены погрешностями используемых в этом диапазоне оптических констант материалов, рассеянием излучения и падением коэффициента отражения на интерфейсах и средней плотностью пленок рассеивающего материала. Другим каналом потерь отраженной интенсивности может быть взаимодействие рентгеновского излучения с наноразмерными неоднородностями в тонких пленках. В рамках проекта будет изучена наноструктура тонких пленок, в том числе «легких» компонентов МИС. Для повышения структурного совершенствования интерфейсов будут применены как стандартные методы, заключающиеся в оптимизации материалов, толщин пленок и нитридации слоев на примере традиционной пары материалов на основе Cr/Sc , так и изучение новых пар материалов W/Be и Cr/Be . Помимо новых материалов и прямого влияния на интерфейс впервые будет изучена возможность понижения химической/диффузионной активности на границах за счет «заполнения» структурных дефектов пленок (пустот) атомами легких газов, например, водорода. Этот подход будет исследован на примере Mo/Si и $Mo/Be/Si$ зеркал.

Публикации по теме работы

Kuzin S. et al. EUV telescope for a Cubesat nanosatellite // Applied Optics. – 2023. – Т. 62. – № 31. – P. 8462-8471.

Kumar N. et al. High thermal stability of the reflectivity of Be/Al multilayer mirrors designed for extreme ultraviolet wavelength // Surfaces and Interfaces. – 2023. – Т. 42. – P. 103414.

Pleshkov R. S. et al. Be/Si/Al multilayer mirrors as the most promising optical elements for spectroscopy and imaging in the spectral region of 17–32 nm // Optics Letters. – 2023. – Т. 48. – № 20. – P. 5301-5304.

Комплексная характеристика и изучение механизма действия практически значимых белковых молекул на основе флуоресцентных белков

Головная организация: ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, г. Москва

Руководитель: Бойко Константин Михайлович, кандидат биологических наук

Область знания: Биология и науки о жизни

Аннотация

Одним из важнейших достижений современной молекулярной биологии является возможность визуализации процессов, происходящих внутри клетки, как на уровне их пространственной локализации, так и во временной развертке. Эксперименты такого рода стали возможны благодаря открытию так называемых флуоресцентных белков (ФБ), являющихся генетически кодируемыми маркерами, идеальными для анализа локализации клеток, клеточных органелл и белков по флуоресцентному сигналу.

Возможность одновременного использования нескольких ФБ с разными спектральными характеристиками привела к развитию новых методов оптической микроскопии, позволяющих изучать многофакторные процессы в живой клетке и многоклеточных организмах. Несмотря на широкое использование ФБ, спектр их применения ограничен рамками их характеристик (спектральных, яркостных и др.), что ограничивает диапазон их применения. В связи с этим существует большая потребность в получении ФБ с определенными характеристиками, которые напрямую связаны с их пространственным строением. Выяснение структурных данных о таких белках позволит использовать методы генетической инженерии для направленного воздействия на их характеристики для тонкой настройки под требуемые задачи визуализации.

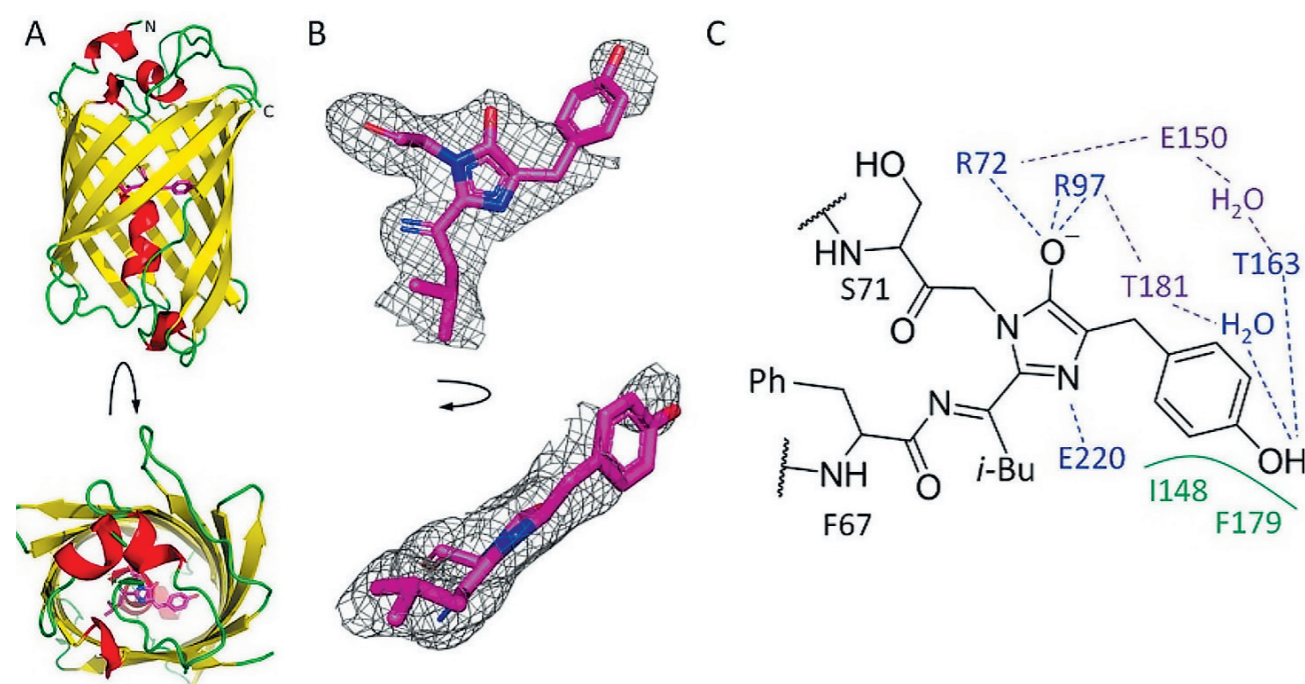


Рисунок 3.7. –Модель структуры белка mRubyFTs148I (A). Структура хромофора (B), и его схема окружения в структуре белка (C)

В рамках проекта планируется провести комплексную структурно-функциональную характеристику двух типов биологических молекул, основанных на ФБ и имеющих важное прикладное значение. Первым типом являются так называемые клеточные таймеры – генетически кодируемые белки, способные менять длину волны своей флуоресценции в процессе созревания, длящегося достаточно продолжительное время (от минут до десятков часов). К белкам данного типа в настоящее время прикован значительный интерес благодаря их применимости для *in vivo* визуализации и количественного определения продолжительности фаз клеточного цикла. Вторым типом изучаемых молекул являются химерные сенсоры на различные клеточные мессенджеры (кальций, калий и пр.). Такие молекулы позволяют проводить прижизненный анализ концентрации мессенджеров в клетках и, соответственно, *in vivo* контролировать их активность.

Публикации по теме работы

Boyko K. M. et al. *Combined Structural and Computational Study of the mRubyFT Fluorescent Timer Locked in Its Blue Form* // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2023. – Т. 24. – № 9. – P. 7906.

Subach O. M. et al. *FNCaMP, ratiometric green calcium indicator based on mNeonGreen protein* // *Biochemical and Biophysical Research Communications*. – 2023. – Т. 665. – P. 169-177.

Subach O. M. et al. *Blue-to-Red TagFT, mTagFT, mTsFT, and Green-to-FarRed mNeptusFT2 Proteins, Genetically Encoded True and Tandem Fluorescent Timers* // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2023. – Т. 24. – № 4. – P. 3279.

«Временная капсула» библиотеки шлифов: динамика структуры, физических свойств и процессов в почвах России за последние 60 лет на основе стохастических реконструкций и машинного обучения по данным компьютерной томографии и малоуглового рассеяния

Головная организация: Почвенный институт им. В.В. Докучаева, г. Москва

Руководитель: Лебедева Марина Павловна, доктор сельскохозяйственных наук

Область знания: Биология и науки о жизни

Аннотация

В Почвенном институте накоплен уникальный материал – почвенные шлифы (плоские тонкие (толщиной 30 микрон) параллельные срезы почвы, закрепленные смолой) из нескольких климатических зон, где почвенные наблюдения, отбор образцов проходил в одних и тех же точках за последние 70 лет. Современные технологии компьютерного анализа изображений, малоуглового рассеяния и стохастических реконструкций, рентгеновской томографии, моделирования в масштабе пор и машинного обучения позволяют на основе этого материала восстановить трехмерную структуру почв и рассчитать их физические характеристики, на количественном уровне определить изменение микростроения почв.

Цель проекта состоит в том, чтобы открыть «временную капсулу» собранных за последние 60 лет почвенных шлифов и определить динамику изменения структуры и физических свойств зонального ряда почв на Европейской территории России. Это позволит выявить влияние климатических параметров на почвенные функции и заложить прочный фундамент прогнозирования изменений почв России в условиях меняющегося климата.

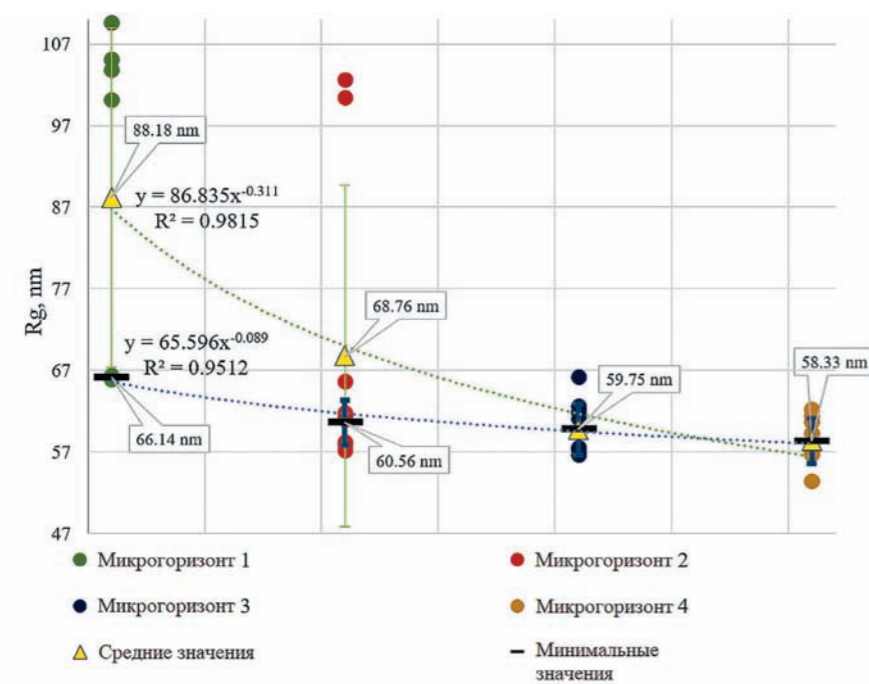


Рисунок 3.8. – Изменение средних значений Rg(nm) в горизонтах почвенного профиля солонца, контрастно отличающихся по содержанию глинистых минералов

Для достижения поставленных в проекте целей необходимо использование синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов», так как это позволит исследовать временную динамику наноструктуры почвы в шлифах, что практически невозможно сделать любым другим из существующих методов. Масштаб и комплексность проекта подчеркиваются использованием подходов классического морфологического описания почв (от микро- до субмикро-строения), количественной оценки профилеформирующих процессов (по шлифам) и самых последних разработок в физике конденсированного состояния (стохастические реконструкции и МУР), обработке изображений, машинном обучении, и моделировании в масштабе пор.

Публикации по теме работы

Plotnikova O. O. et al. A dataset of microstructure features and physicochemical properties of soils of the solonetzic complex in 2022 (Caspian lowland) // *Data in Brief*. – 2023. – T. 50. – P. 109493.

Plotnikova O. O. et al. A dataset of soil microstructure features and physicochemical properties for 1968 and climate sequence for 1951-1992 in the Caspian lowland // *Data in Brief*. – 2023. – T. 46. – P. 108909.

Создание и структурная характеристика новых типов парамагнитных (псевдо)клатрохелатов 3d-переходных металлов и наноразмерных гибридных систем на их основе – перспективных предшественников парамагнитных меток и молекулярных магнитных материалов

Головная организация: Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, г. Москва

Руководитель: Белов Александр Сергеевич, доктор химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Спинтроника, которая основана на воздействии на электронные свойства материи внешним магнитным полем, является одним из наиболее перспективных направлений в современной микроэлектронике. Носителем информации в спинтронных устройствах является ток спинов, а в качестве структурных единиц используется магнитно-активные изолированные молекулы («молекулярные магнетики»), содержащие один или несколько неспаренных электронов. Такие соединения могут быть получены с использованием воспроизводимых синтетических подходов, обеспечивающих идентичность всех синтезированных молекул, а их магнитные свойства можно контролировать посредством направленного молекулярного дизайна таких соединений. (Псевдо)клатрохелаты парамагнитных ионов металлов, обладающие уникальными химическими и физическими свойствами и магнитными характеристиками, являются перспективными элементами молекулярной электроники (в частности, таковыми для молекулярных компьютеров и квантовых точек), молекулярными магнитами с рекордными характеристиками и предшественниками магнитных материалов на их основе, а также перспективными парамагнитными метками для молекулярной диагностики ряда социально-значимых заболеваний, а также таковыми для структурной биологии и магнитно-резонансной томографии. Парамагнитные (псевдо)клатрохелаты металлов и наноразмерные гибридные системы на их основе с заданной геометрией и химической структурой молекул и требуемыми физическими и физико-химическими свойствами перспективны для создания парамагнитных меток. Наличие реакционно-способных и функционализирующих заместителей в молекулах клатрохелатов и их псевдомacroбициклических аналогов позволяет проводить их дальнейшую модификацию, направленно изменять физические свойства этих комплексов, а также получать новые типы наноразмерных гибридных систем, парамагнитных меток и молекулярных магнитных материалов. Состав и строение полученных (псевдо)клатрохелатных комплексов и наноразмерных гибридных соединений на их основе будут установлены с использованием данных синхротронных методов EXAFS и PCA.

Парамагнитные (псевдо)клатрохелаты 3d-переходных металлов этих типов и наноразмерные гибридные системы на их основе будут получены впервые, а предложенные синтетические методы их получения будут оригинальными. Несмотря на заметный прогресс в этой области, достигнутый за последнее десятилетие, поиск новых молекулярных соединений с большими временами магнитной релаксации и переключаемыми магнитными свойствами является, по-прежнему, актуальной задачей.

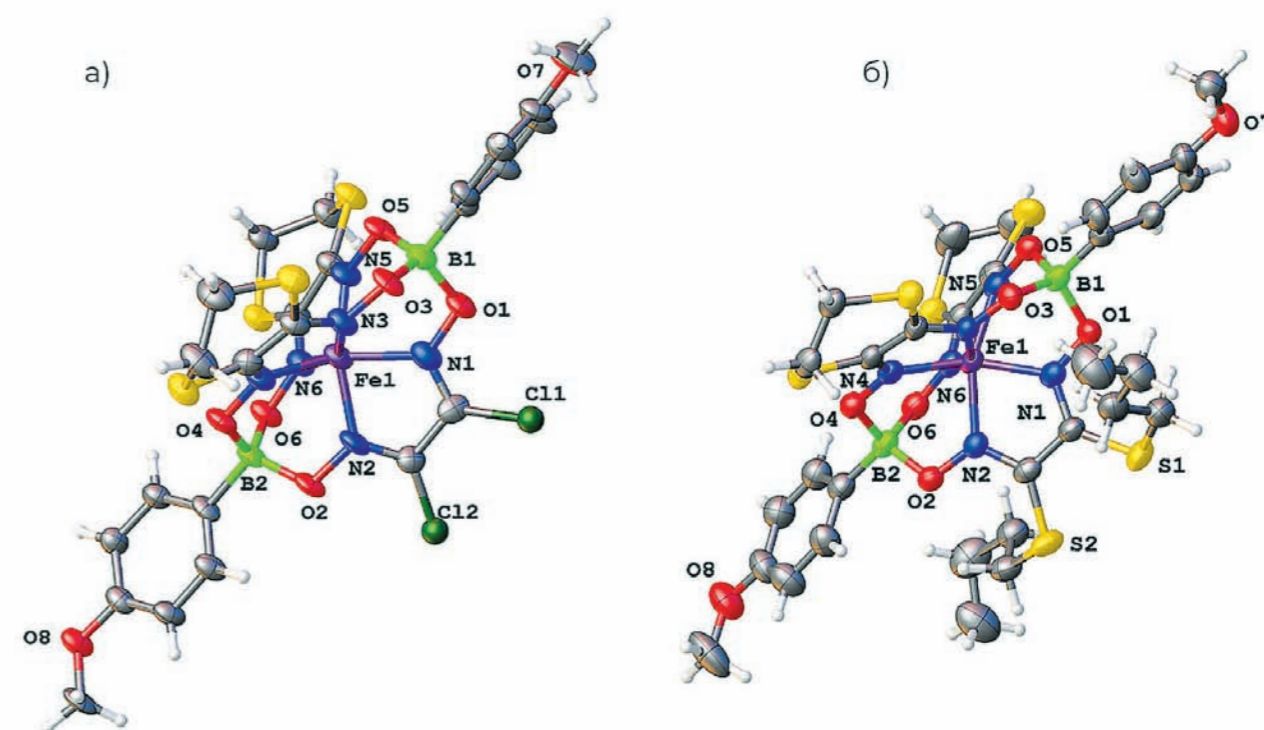


Рисунок 3.9. – Общий вид клатрохелатов: а) $Fe(S_2 - Nx)_2(Cl_2Gm)(B_4 - C_6H_4OCH_3)_2$ и б) $Fe(S_2 - Nx)_2((S - n - C_4H_9)_2Gm)(B_4 - C_6H_4OCH_3)_2$

Публикации по теме работы

Limarev I. P. et al. Multistep synthesis, reactivity and X-ray structure of the anisole-terminated iron (II) polyhalogenoclathrochelates and their monoribbed-functionalized macrobicyclic derivatives // *Transition Metal Chemistry*. – 2022. – Т. 47. – № 7. – P. 321-331.

Balatskiy D. V. et al. 57 Fe Mössbauer and DFT study of the electronic and spatial structures of the iron (ii) (pseudo) clathrochelates: the effect of ligand field strength // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2023. – Т. 25. – № 28. – P. 18679-18690.

Belova S. A. et al. Effects of solvatomorphism, the nature of a chelating ligand synthon and a counterion on the single crystal XRD structure and SMM properties of paramagnetic monocapped cobalt (ii) tris-pyrazoloximates // *Dalton Transactions*. – 2024. – Т. 53. – № 4. – P. 1482-1491.

Взаимодействие плутония с минералами и природным органическим веществом: от физико-химических форм к термодинамическому моделированию

Головная организация: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва

Руководитель: Романчук Анна Юрьевна, кандидат химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

В настоящее время многие страны разрабатывают программы по реабилитации ранее загрязненных территорий, для чего необходима информация о путях миграции радионуклидов в окружающей среде. В то же время данные о физико-химических формах радионуклидов также необходимы для долгосрочной оценки безопасности проектируемых геологических хранилищ радиоактивных отходов и отработанного ядерного топлива.

Плутоний является одним из основных элементов, химическое поведение которого остается плохо прогнозируемым ввиду сложности его химических свойств. Отсутствие единой термодинамической модели, описывающей поведение плутония, ограничивает успешное прогнозирование его миграции в окружающей среде. Поэтому общая цель данного проекта состоит в достижении понимания и термодинамическом описании взаимодействия плутония с минералами и природными органическими веществами. Одним из уникальных свойств плутония является его способность присутствия в 4 различных степенях окисления ($Pu(III)$, $Pu(IV)$, $Pu(V)$, $Pu(VI)$) и легкость перехода между ними. Предыдущие эксперименты показали протекание окислительно-восстановительных реакций и реакций образования наночастиц диоксида плутония при взаимодействии с природными системами. Поэтому для термодинамического описания необходим учет одновременно реакций хемосорбции, окислительно-восстановительных реакций и реакций образования наночастиц диоксида плутония.

В рамках данного проекта планируется исследовать реакции плутония и элементов-аналогов, объединив лабораторные эксперименты, характеризацию физико-химических форм с использованием спектроскопических и микроскопических методов и термодинамическое моделирование. Использование источника синхротронного излучения позволяет проводить характеризацию объектов уникальным методом спектроскопии рентгеновского поглощения, что дает возможность получить информацию о степени окисления и локальной структуре как плутония, так и элементов-аналогов. Использование элементов-аналогов, таких как церий, уран и нептуний позволит, с одной стороны, упростить исследуемые системы, так как для них не характерно такое большое количество возможных степеней окисления. С другой стороны, термодинамическое моделирование реакций Ce, U, Np наряду с плутонием позволит создать действительно универсальный подход к описанию исследуемых процессов.

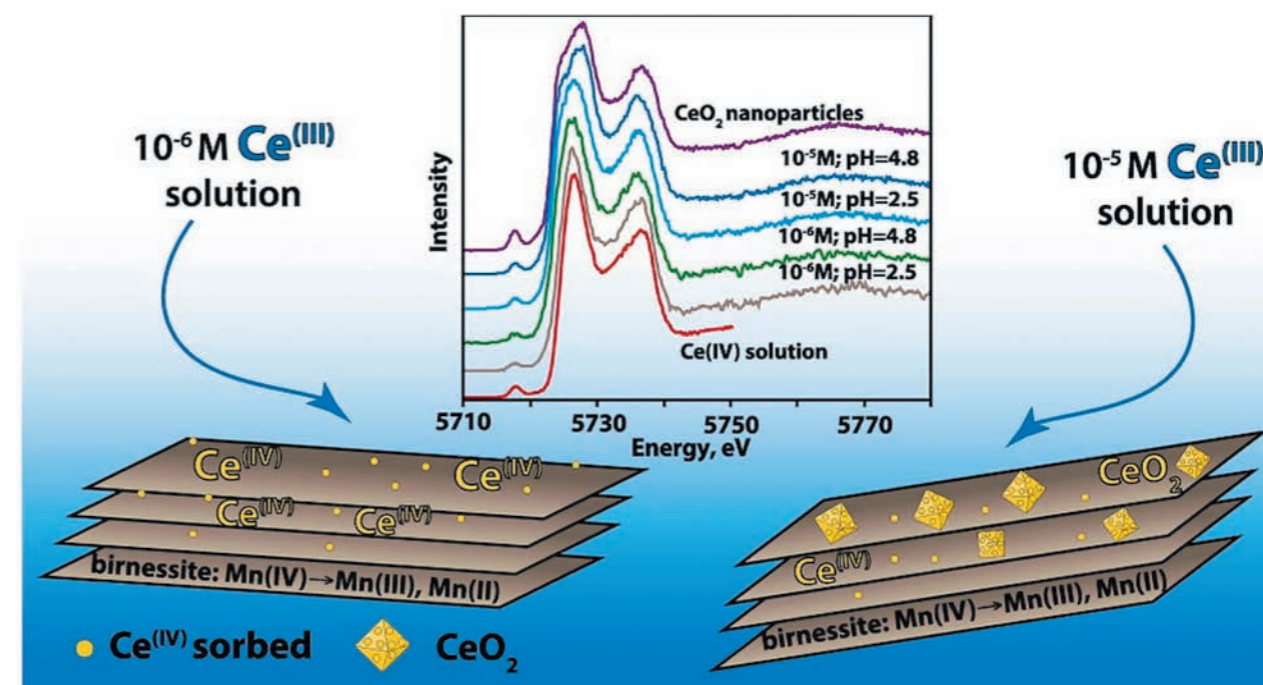


Рисунок 3.10. – Схема сорбции Ce (III) на бернессите

Публикации по теме работы

Romanchuk A. Y. et al. U (VI), Np (V), Eu (III) sorption on goethite: A wide-ranging multiradionuclide dataset and uncertainty-aware parametrization of surface complexation models // *Frontiers in Nuclear Engineering*. – 2022. – T. 1. – P. 969171.

Romanchuk A. Y. et al. Oxidation and Nanoparticle Formation during Ce (III) Sorption onto Minerals // *Environmental Science & Technology*. – 2023. – T. 57. – № 13. – P. 5243-5251.

Магнитно-структурные корреляции в ряду марганцево-нитроксильных комплексов с высокими температурами перехода в магнитно-упорядоченное состояние

Головная организация: Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва

Руководитель: Третьяков Евгений Викторович, доктор химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Дизайн магнетиков на молекулярной основе – активно развивающаяся междисциплинарная область исследований. В ней одно из направлений связано с конструированием металл-нитроксильных систем, способных при достаточно высоких температурах переходить в магнитно-упорядоченное состояние. Ярким достижением здесь служит получение двух полимерных комплексов марганца с нитроксилами со значениями критических температур 40 и 46 К. Вместе с тем, дальнейшего систематического изучения, направленного на повышение температур магнитно-фазового перехода путем варьирования компонентов молекулярной сборки, проведено не было. Основным сдерживающим фактором стало то, что синтезированные магнетики представляли собой мелкокристаллические образцы, что сильно затрудняло установление их структуры традиционным методом рентгеноструктурного анализа.

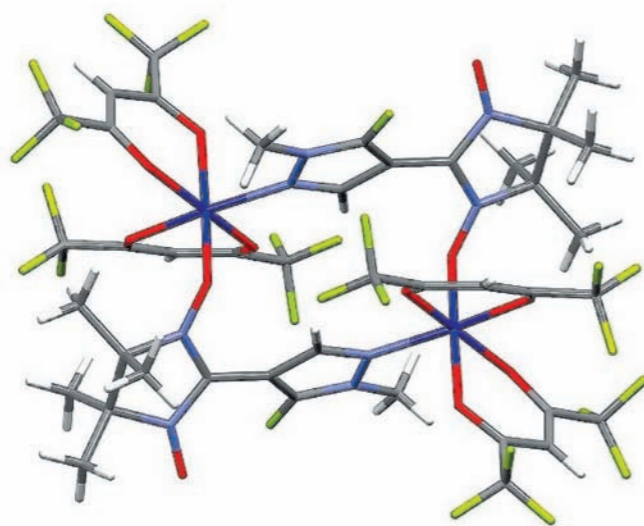


Рисунок 3.11. – Молекулярная структура комплекса $[Co(hfac)_2(LF)_2]$ (цветовой код: Co: фиолетовый, N: синий, O: красный, F: зеленоватый, C: серый, H: белый)

Настоящее исследование впервые ставит задачу синтеза широкого ряда марганец-нитроксильных и неизвестных ранее кобальт-нитроксильных комплексов слоисто-полимерного строения (с мотивом медовых сот) с последующим анализом присущих им магнитно-структурных корреляций. Ключевым моментом здесь служит получение структурной информации с использованием станций Белок/РСА и СТМ «КИСИ-Курчатов». Именно наличие структурных данных с привязкой к магнитным характеристикам позволит выявить факторы, способствующие созданию материалов с требуемыми магнитными характеристиками, в том числе с еще более высокими критическими температурами.

Публикации по теме работы

Kudryavtseva E. et al. 5-Fluoro-1-Methyl-Pyrazol-4-yl-Substituted Nitronyl Nitroxide Radical and Its 3d Metal Complexes: Synthesis, Structure, and Magnetic Properties // Crystals. – 2023. – Т. 13. – № 12. – P. 1655.

Balatskiy D. V. et al. 57 Fe Mössbauer and DFT study of the electronic and spatial structures of the iron (ii)(pseudo) clathrochelates: the effect of ligand field strength//Physical Chemistry Chemical Physics. – 2023. – Т. 25. – № 28. – P. 18679-18690.

Одноатомные родиевые катализаторы на основе наноразмерного цеолита ZSM-5 с микро и микро-мезопористой структурой — путь к высокоэффективной технологии получения практически важных соединений C₂₊ углеводородов и уксусной кислоты через конверсию метана с участием оксидов углерода и кислорода

Головная организация: Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, г. Москва

Руководитель: Колесниченко Наталия Васильевна, доктор химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Проект направлен на разработку принципов создания высокоэффективных одноатомных катализаторов низкотемпературной конверсии метана в практически важные соединения – C₂₊ нефтехимические продукты (C₂₊ углеводороды и уксусную кислоту). Постепенный переход от нефтяного сырья к природному газу в химической отрасли ставит перед химиками задачу разработки принципиально новых подходов к получению нефтехимических продуктов, что предполагает создание эффективных методов активации CH₄ с превращением этого одноуглеродного субстрата в более сложные органические соединения.

Новизна настоящего проекта заключается в комплексной разработке подходов к синтезу одноатомных родиевых цеолитсодержащих катализаторов и в оценке их эффективности в реакциях взаимодействия метана с оксидами углерода и кислородом с получением ценных нефтехимических продуктов.

Впервые будет синтезирована серия цеолитсодержащих одноатомных родиевых катализаторов в двух вариантах – с приготовлением монородиевой и биметаллических систем, с легированием цеолитной матрицы тонкодисперсным слоем второго металла (цинка, меди, лантана, магния). С помощью метода EXAFS-спектроскопии для монометаллических систем будет подтверждено формирование одноатомных металлоцентров, а для биметаллических – исследовано влияние легирующих элементов на структуру локального окружения родия, закрепленного на поверхности цеолита.

Впервые такие биметаллические катализаторы, с моноатомным распределением активного компонента и высокодисперсным распределением легирующего металла, будут протестированы на активность и селективность в реакциях конверсии метана, при взаимодействии с оксидами углерода (с добавками кислорода), в уксусную кислоту и в углеводороды C₂₊ (по реакции ОКМ- CO₂), также будет исследована стабильность одноатомных активных центров в условиях этих реакций. Ключевая роль в данных исследованиях будет отведена методам, основанным на использовании синхротронного излучения.

Публикации по теме работы

Batova T. I. et al. Oxidative carbonylation of methane into acetic acid: Effect of metal (Zn, Cu, La, and Mg) doping on Rh/ZSM-5 activity // Microporous and Mesoporous Materials. – 2024. – Т. 366. – P. 112953.

Kolesnichenko N. V. et al. Oxidative Carbonylation of Methane to Acetic Acid over Commercial Rhodium-Modified ZSM-5 Zeolites // Petroleum Chemistry. – 2023. – Т. 63. – № 6. – P. 648-654.

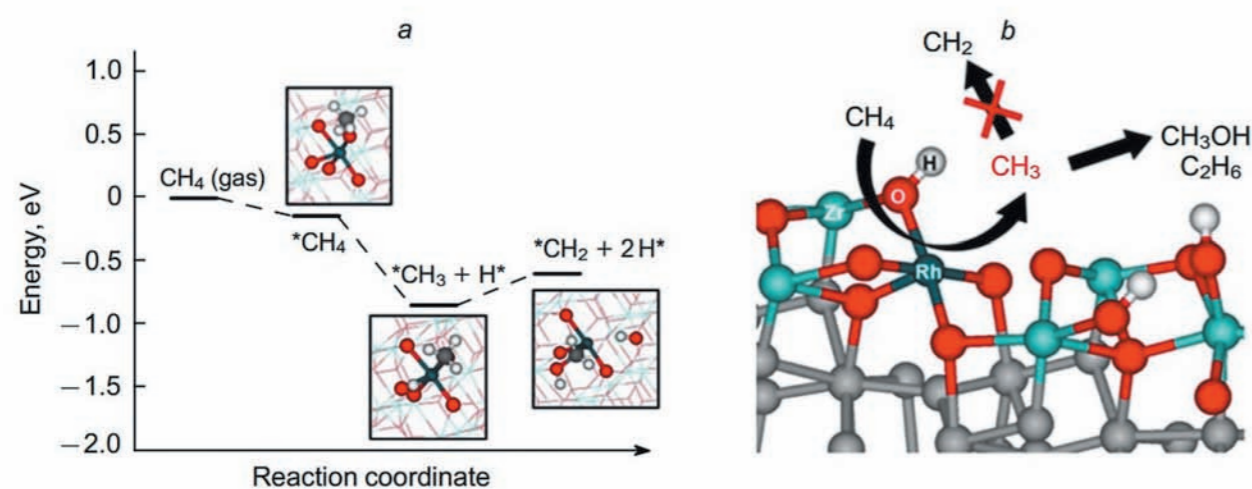


Рисунок 3.12. – Энергетический профиль дегидрирования метана на одноатомном катализаторе Rh/ZrO₂ (а) и пути конверсии CH₄ (б). Звездочка относится к возбужденному состоянию

Оценка состояния загрязненных почв и растений с использованием синхротронных методов

Головная организация: Южный федеральный университет, Ростовская область

Руководитель: Шуваева Виктория Анатольевна, доктор физико-математических наук

Область знания: Науки о Земле

Аннотация

Химическое загрязнение окружающей среды является одной из наиболее серьезных проблем, стоящих перед современным человечеством. До 95% загрязнителей, поступающих в экосистему, аккумулируется почвой. Одними из наиболее потенциально токсичных элементов в почве являются тяжелые металлы (ТМ) – ксенобиотики, которые не подвержены биodeградации с течением времени, однако, способны изменять форму своих соединений и проявлять по отношению к живым организмам канцерогенные, мутагенные и токсичные свойства. Для оценки экологических рисков, связанных с транслокацией ТМ по пищевой цепи, необходимы данные о формах их нахождения в почвах, определяющих миграционную способность и токсичность. Проект направлен на изучение видообразования и структурных трансформаций макро- и наноформ металлов в твердофазных частицах почв и растений с использованием инновационных методов синхротронного рентгеновского излучения. Синхротронные методы анализа будут апробированы на высокозагрязненных почвах при заданных условиях загрязнения (вегетационные модельные опыты) и в условиях природно-антропогенного воздействия (отбор образцов в импактных зонах с очень высоким уровнем антропогенной нагрузки).

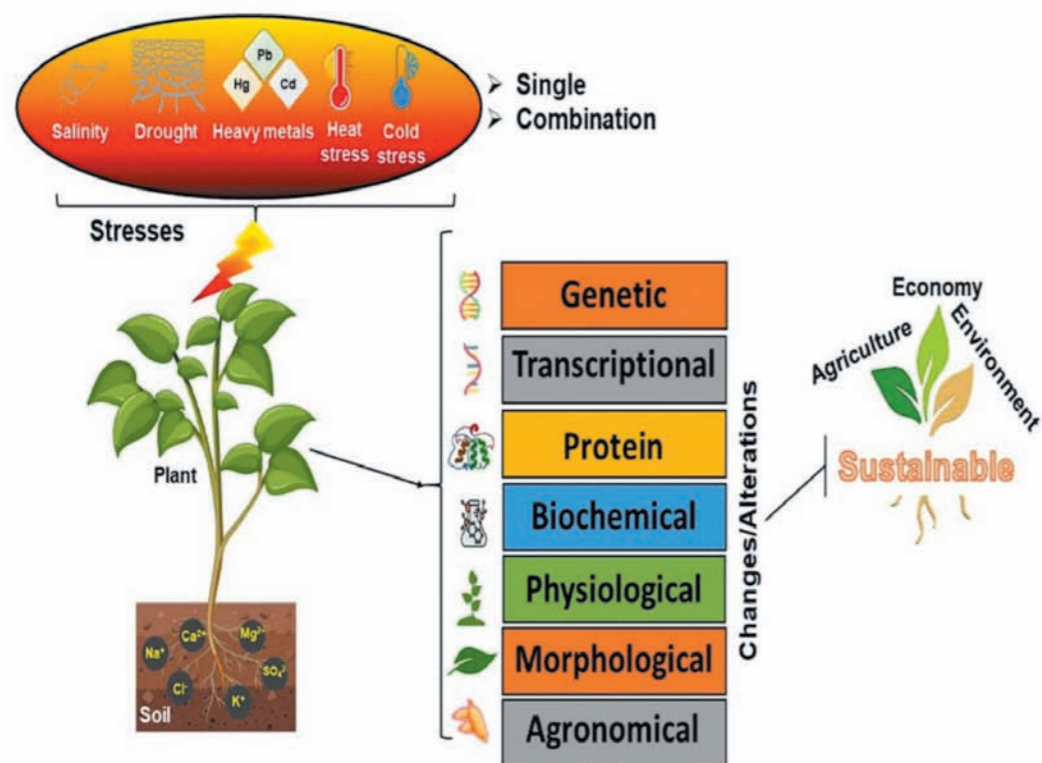


Рисунок 3.13. – Влияние различных абиотических стрессов на рост, развитие и продуктивность растений

С целью разработки эффективных технологий ремедиации загрязненных почв будут синтезированы композиты на основе ряда оксидов со структурой шпинели и металл-органических каркасных полимеров. Полученные композиционные соединения будут обладать улучшенными сорбционными свойствами. Будут установлены параметры локального окружения и электронной структуры активных центров металлов в искусственных сорбентах методами рентгеновской спектроскопии поглощения (XANES и EXAFS) и дифракции. С использованием инфраструктуры «КИСИ-Курчатов», нейтронно-активационного анализа и современных методов электронной микроскопии есть все основания ожидать получения принципиально новых знаний об образовании соединений металлов в почвах и растениях и методах их инактивации.

Публикации по теме работы

Kirichkov M. V. et al. Application of X-ray based modern instrumental techniques to determine the heavy metals in soils, minerals and organic media // Chemosphere. – 2023. – P. 140782.

Kumari A. et al. Speciation of macro-and nanoparticles of Cr2O3 in Hordeum vulgare L. and subsequent toxicity: A comparative study // Environmental Research. – 2023. – T. 223. – P. 115485.

Faizan M. et al. Nanoparticle mediated plant tolerance to heavy metal stress: what we know? // Sustainability. – 2023. – T. 15. – № 2. – P. 1446.

Фундаментальные основы экстракционного извлечения лантанидов и актинидов при переработке отработанного ядерного топлива новыми гибридными N,O-реагентами: применение синхротронных методов и технологий исследования материалов

Головная организация: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва

Руководитель: Борисова Наталия Евгеньевна, кандидат химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Проект направлен на установление структур комплексов ионов актинидов и других элементов (конструкционных металлов, солеобразующих элементов и компонентов отработанного ядерного топлива - ОЯТ) в твердом состоянии, растворе, а также на границе раздела органической и водной фаз с использованием современного арсенала синхротронных рентгеноспектральных методов исследования кристаллических образцов, растворов с металлоорганическими комплексами и молекулярных пленок на поверхности жидкости. Полученная информация даст понимание механизмов комплексообразования в экстракционных средах и позволит лучше управлять селективностью и эффективностью экстракционных процессов при глубоком фракционировании ОЯТ. Предполагается провести детальное исследование механизмов комплексообразования ионов актиноидов с гибридными NO- и NS- донорными реагентами различной природы в различных средах, прежде всего, в промышленно приемлемых разбавителях: керосин, Ф-3, октанол.

В рамках выполнения проекта будут впервые исследованы структуры комплексов фосфиноксидных, фосфинсульфидных, амидных и тиоамидных гетероциклических и алициклических экстрагентов, обладающих селективностью по отношению к минорным актинидам. В результате выполнения проекта впервые будут установлены механизмы извлечения ионов металлов в органические разбавители гибридными экстрагентами и исследованы структуры образующихся комплексов, что позволит управлять их селективностью в широких пределах и создать экстракционные системы для глубокого фракционирования растворов ОЯТ.

Публикации по теме работы

Faizan M. et al. Nanoparticle mediated plant tolerance to heavy metal stress: what we know? // Sustainability. - 2023. - Т. 15. - №. 2 - P. 1446.

Konopkina E. A. et al. Solvent Extraction and Complexation Studies of Pyridine-di-Phosphonates with Lanthanides (III) in Solutions // Solvent Extraction and Ion Exchange. - 2023. - Т. 41. - № 5. - P. 627-653.

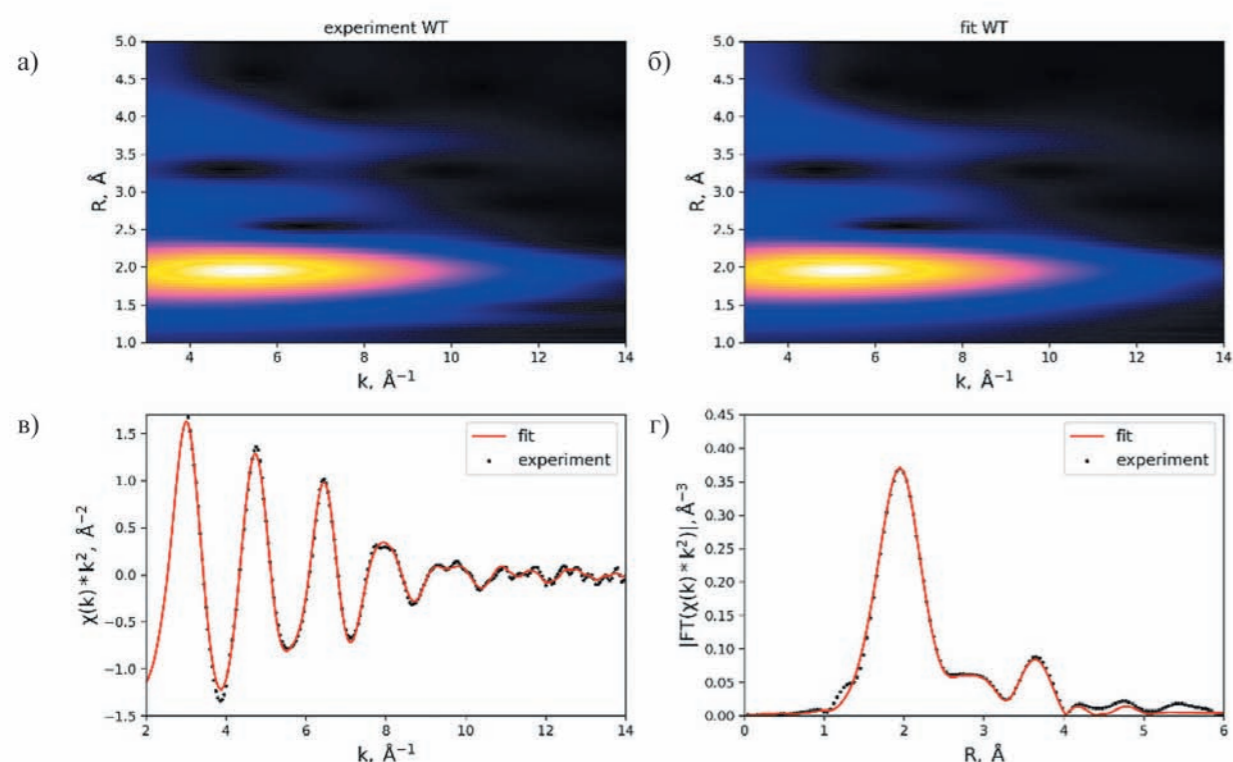


Рисунок 3.14. – Экспериментальные и модельные спектры EXAFS для комплекса с центральным атомом лютеция (в, г). Подгонка выполнена в пространстве вейвлет-преобразования (а, б) методом Монте-Карло (программа EvAX)

Фундаментальные закономерности взаимодействия молекулярных распознающих элементов на основе олигонуклеотидов с мишенями различной природы

Головная организация: ФИЦ «Красноярский научный центр» Сибирского отделения РАН, Красноярский край

Руководитель: Кичкайло Анна Сергеевна, доктор биологических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Чувствительность диагностических систем и эффективность адресной терапии определяется энергией взаимодействия между распознающими и/или воздействующими элементами (лигандами) и мишенями. Определение механизмов и видов взаимодействия между молекулярными распознающими элементами на основе олигонуклеотидов с мишенями различной природы является важной фундаментальной задачей, решение которой позволит увеличить точность диагностики и эффективность адресной терапии.

Проект направлен на установление фундаментальных закономерностей взаимодействия молекулярных распознающих элементов на основе олигонуклеотидов с мишенями различной природы для создания чувствительных сенсоров. Они будут использоваться для количественного определения аналитов и эффективных средств адресной терапии. С использованием синхротронного излучения методами МУПП, EXSFS, EXAFS будут восстановлены пространственные структуры и симметрия ближайшего окружения во взаимодействующих молекулах поодиночке и в комплексах. Впервые будет изучена возможность замены в буферных системах ионов легких металлов тяжелыми, а в случае сохранения свойств молекулярных распознающих элементов, тяжелые металлы будут использованы для изучения пространственной симметрии молекул на атомарном уровне.

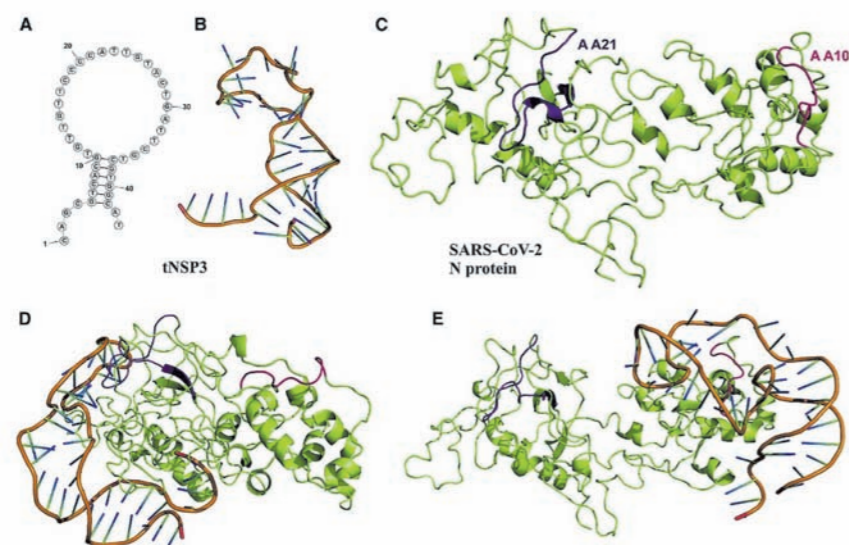


Рисунок 3.15. – (А) Вторичная и (В) третичная структуры аптамера tNSP3. (С) Третичная структура нуклеокапсидного белка SARS-CoV-2. (D и E) Комплексы tNSP3, связывающиеся с мотивами AA21 и AA10 на белке N

Будут получены новые знания о строении и пространственной структуре нескольких молекулярных распознающих элементов и их молекулах-мишенях. Эти данные лягут в основу разработки биосенсоров и терапевтических препаратов, возможность создания которых будет обоснована экспериментально в рамках проекта.

Результаты проекта будут использованы при разработке адресных лекарственных средств, воздействующих только на определенные мишени, установление механизмов действия препаратов, определения их специфичности. Полученные в результате проекта знания о количественных характеристиках связывания и механизмах, обеспечивающих взаимодействие на молекулярном уровне, необходимы для разработки точных тест-систем с возможностью количественного определения очень низких концентраций аналитов.

Публикации по теме работы

Poolsup S. et al. Discovery of DNA aptamers targeting SARS-CoV-2 nucleocapsid protein and protein-binding epitopes for label-free COVID-19 diagnostics // Molecular Therapy-Nucleic Acids. – 2023. – Т. 31. – P. 731-743.

Mironov V. et al. Structure - and interaction - based design of anti-SARS-CoV-2 aptamers // Chemistry-A European Journal. - 2022. - Т. 28. - № 12. - P. e202104481.

Договоры в рамках Соглашений с РФФ 2023-2026 гг.

Магнитные структуры людвигитов

Головная организация: ФИЦ «Казанский научный центр» РАН, Республика Татарстан

Руководитель: Еремина Рушана Михайловна, доктор физико-математических наук

Область знания: Физика и науки о космосе

Аннотация

Одним из основных направлений развития физики магнитных явлений становится спинтроника, которая изучает свойства спина с целью обогащения новыми функциональными возможностями электронных устройств. Активно изучаются спиновая динамика в низкоразмерных магнетиках, влияние квантовых флуктуаций, замещение 3d- и 4f- ионами, понижение размерности. Синтез и исследование новых низкоразмерных соединений открывает потенциальные возможности создания новых устройств. Целью предлагаемого проекта является разработка и рост новых монокристаллов людвигитов состава $M_{1-x}M_xBO_5$ ($M = 3d$ – элемент Fe, Co, Ni, Cr, Mn, Mo, Ti, Nb). Этот проект позволит получить новые знания по фундаментальным магнитным, диэлектрическим, транспортным свойствам людвигита $M'_{1-x}M''_xBO_5$ ($M', M'' = Fe, Co, Ni, Cr, Mn, Mo, Ti, Nb$), позволит построить модель обменных связей 3d- ионов, определить тип магнитного упорядочения. Конкретные цели проекта заключаются в следующем:

- Разработка эффективных стратегий синтеза новых кристаллов людвигитов.
- Оценка потенциала применения $M'_{1-x}M''_xBO_5$ ($M', M'' = Fe, Co, Ni, Cr, Mn, Mo, Ti, Nb$) для генерации ультра и гиперзвука, так как данные соединения обладают магнитострикцией.
- Выяснение транспортных свойств с помощью теории функционала плотности (DFT) на основе расчетов *ab initio*.
- Понимание поведения магнитного упорядочения, природы магнитных фазовых переходов в $M'_{1-x}M''_xBO_5$ ($M', M'' = Fe, Co, Ni, Cr, Mn, Mo, Ti, Nb$) путем измерения магнитных свойств, нейтронного рассеяния и измерений электронного спинового резонанса (ЭПР).
- Изучение кристаллической структуры, фазового перехода, химии дефектов методом SEM, TEM, XPS в корреляции с температурно-зависимыми магнитными и диэлектрическими свойствами.

Ожидаемые результаты

В этом проекте будет проведена работа по изучению взаимодействий между электроном, спином и фононом в монокристаллах людвигитов состава $Mn_{1-x}M_xBO_5$ ($M = 3d$ – элемент). Будут синтезированы изотопически чистые образцы, в состав которых будет входить только изотоп бора-11, так как изотоп бора-10 характеризуется высоким эффективным сечением захвата тепловых нейтронов ($3 \times 10^{-25} \text{ м}^2$). Природное содержание изотопов бора в образце сильно осложнит проведение экспериментов на нейтронах. Монокристаллы людвигита будут выращены методом кристаллизации из раствора в расплаве (метод флюса) из гидротермальных растворов. Необходимо отметить, что не все 3d- элементы входят в состав монокристалла

$M'_{1-x}M''_xBO_5$ ($M = 3d$ – элемент). Кроме того, этот проект позволит получить новые знания по фундаментальным магнитным, диэлектрическим, транспортным свойствам людвигитов состава $Mn_{1-x}M_xBO_5$ ($M = 3d$ – элемент), позволит построить модель обменных связей 3d- ионов, определить тип магнитного упорядочения. Ожидаются следующие конкретные результаты проекта:

- Определение наиболее эффективных стратегий синтеза монокристаллов с заданными характеристиками.
- Экспериментальные данные по структурным, магнитным, диэлектрическим и сегнетоэлектрическим свойствам людвигитов $M'_{1-x}M''_xBO_5$ ($M = 3d$ – элемент).
- Углубленное понимание электрон-спиновых, электрон-электронных, электрон-фононных взаимодействий в $M'_{1-x}M''_xBO_5$ ($M = 3d$ – элемент).
- Знания о роли перехода в типе проводимости, октаэдрического упорядочения в магнитных свойствах $M'_{1-x}M''_xBO$ ($M = 3d$ – элемент).

Публикации по теме работы

Popov D. V. et al. Magnetism and specific heat of ludwigites Mn₁17Co1. 83BO5 and Mn1. 39Co1. 61BO5 // Journal of Alloys and Compounds. – 2024. – Т. 976. – P. 173143.

Метод получения высокоточных структурных данных из синхротронных рентгенодифракционных исследований мелкокристаллических активных фармацевтических субстанций

Головная организация: Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, г Москва

Руководитель: Вологжанина Анна Владимировна, кандидат химических наук

Область знания: Физика и науки о космосе

Аннотация

Для развития многих областей химии, материаловедения, биологии, фармакологии и соответствующих междисциплинарных исследований необходимы точные данные, касающиеся атомной и молекулярной структуры объектов, которые данные дисциплины изучают. Наиболее важной задачей при получении таких данных является установление информации о молекулярном и кристаллическом строении различных соединений, входящих в состав функциональных материалов или фармацевтических композиций. Несмотря на то, что ряд задач может быть решен с помощью лабораторного дифрактометрического оборудования, возможности порошковой дифракции, более распространенной, чем монокристаллическая, для получения точных структурных данных, особенно в тех случаях, когда получение монокристалла невозможно, ограничены. В ходе выполнения проекта предполагается разработать методику проведения порошкового рентгенодифракционного эксперимента с привлечением квантовых расчетов для получения высокоточных данных о молекулярном и кристаллическом строении соединений. В качестве объектов исследования будут выбраны ряд твердых форм признанных активных фармацевтических субстанций, кристаллическая структура которых неизвестна до сих пор или вызывает сомнения, таких как тикагрелор (действующее вещество против острого коронарного синдрома, форма III), софосбувир (лекарственный препарат для лечения гепатита С, форма VII), тофацитиниб (средство от ревматоидного артрита), вандетаниб и его соли (противораковая активность, торговая марка Caprelsa), палбоциклиб и его соли, свободное основание и соли осимертиниба, дапаглифлозин, соли ибрутиниба; в том числе полиморфы, соли, сольваты и сокристаллы, а также композиции на их основе. В качестве таких композиций предполагается использовать инертные вещества, входящие в состав таблеток (крахмал, диоксид кремния и титана, моногидрат лактозы, целлюлоза). Подобные исследования являются принципиально новыми и не проводились ранее. Для достижения заявленных целей предполагается использовать синхротронное излучение станции Белок/РСА «КИСИ-Курчатов» с применением в отдельных случаях охлаждения порошковых образцов до низких температур с целью увеличения интенсивности высокоугловых рефлексов и соответствующего снижения тепловых колебаний атомов. В качестве вспомогательных методов будет использована монокристаллическая рентгеновская дифракция, лабораторная порошковая рентгеновская дифракция, квантовохимические расчеты, ЯМР-спектроскопия твердого тела, ДСК/ТГА. Применение дополнительных методов позволит провести предварительные исследования, независимым образом доказать достоверность решения структуры и выявить факторы, ответственные за стабилизацию структуры. Коллектив участников обладает большим опытом для решения сходных задач,

в частности, работал над разработкой методики проверки структурных моделей, полученных при решении и уточнении порошковых рентгенодифракционных данных, измеренных на лабораторном оборудовании с помощью квантовохимических расчетов и специфической статистической обработки данных. Данная методика в отдельных аспектах будет использована для выполнения гранта, но не может полностью быть перенесена на синхротронные дифракционные данные из-за отличий в характере измерения и обработки. В ходе выполнения гранта РФФИ 20-13-00241 участники продемонстрировали навыки синтеза и кристаллизации различных солей, сольватов и сокристаллов признанных активных фармацевтических субстанций и их соединений включения на основе сульфидов металлов слоистого строения. Проведение исследований по данному проекту позволит оптимизировать производство новых лекарственных препаратов, выявить вклады различных факторов на точность структурных данных, получаемых методом порошковой рентгеновской дифракции и адаптировать методики уточнения структурных данных для распространённых программ уточнения.

С помощью порошковой рентгеновской дифракции на станции Белок/РСА установлено кристаллическое строение моногидрата гидрохлорида нилотиниба, являющегося активной фармацевтической субстанцией препарата Tasigna от хронического миелолейкоза. Молекулярная конформация катиона в кристалле отличается от таковой молекулы исходного нилотиниба и его сольватов за счет вращения заместителей относительно одинарных связей C-N, C-O и C-C.

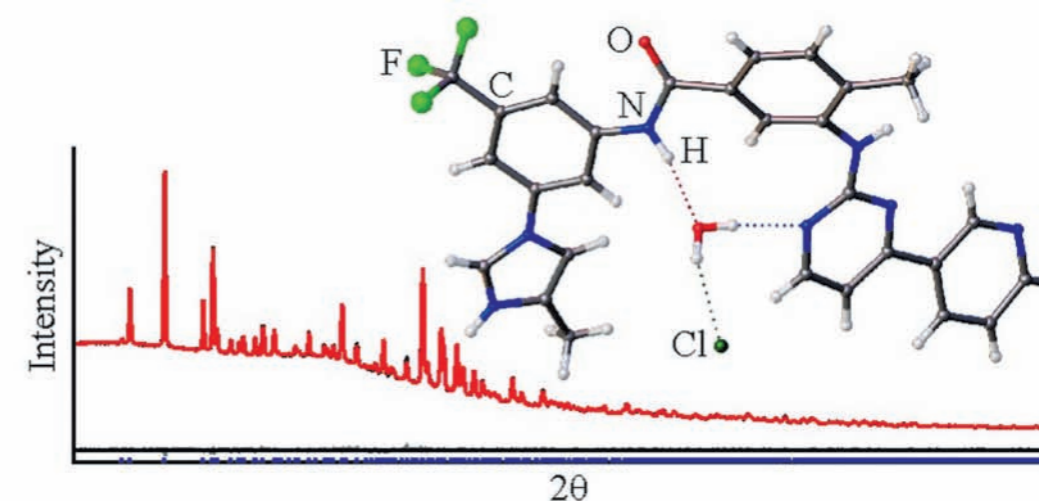


Рисунок 3.15 – Порошкограмма и модель структуры моногидрата гидрохлорида нилотиниба

Публикации по теме работы

Buikin P. A. et al. 9-Ethyl-6, 6-dimethyl-8-[4-(morpholin-4-yl) piperidin-1-yl]-11-oxo-6, 11-dihydro-5 H-benzotriazole-3-carbonitrile Hydrochloride // Molbank. – 2024. – Т. 2024. – № 1. – P. M1759.

Головешкин А.С. и др. Кристаллическое строение моногидрата гидрохлорида нилотиниба по данным порошковой рентгеновской дифракции // Журнал структурной химии. – 2024. – Т. 65. – № 3. – С. 124349.

Время-разрешенная рентгенооптическая диагностика лазерно-индуцированных нестационарных состояний вещества

Головная организация: Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», г. Москва

Руководитель: Мареев Евгений Игоревич, кандидат физико-математических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Проект нацелен на рентгеноструктурную диагностику фотоиндуцированных и нестационарных процессов с суб-нс временным разрешением. Излучение рентгеновского диапазона является уникальным инструментом для структурного анализа конденсированного вещества (в том числе непрозрачной для видимого излучения) за счет суб-нм длины волны. С помощью таких техник как XRD (рентгеновская дифракция) можно непосредственно наблюдать обратимые деформационные процессы и изменения структуры среды, в частности, фазовые переходы, сопровождающиеся разрывом и трансформацией связей. В проекте такие нестационарные процессы будут инициироваться наносекундными и фемто/пикосекундными лазерными импульсами, синхронизированными с источником синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов». В НИЦ «Курчатовский институт» созданы уникальные условия для проведения время-разрешенной диагностики обратимых и нестационарных процессов в веществе с пикосекундным временным разрешением за счет ранее разработанных методов синхронизации импульсного лазерного излучения с источником синхротронного излучения (СИ). Это дает возможность расширить возможности установки класса мегасайенс на нестационарные сверхбыстрые (суб-нс) процессы. В проекте планируется использовать интенсивные ($>10^{11}-10^{12}$ Вт/см²) короткие (нс и/или пс/фс) лазерные импульсы для инициирования нестационарного экстремального состояния вещества. При таких высоких интенсивностях в образце могут образовываться новые, ранее неизученные, фазы. Из-за сильной нестационарности воздействия фазовые переходы могут происходить на суб-пс временном масштабе, а пороги по давлению и температуре в таком случае могут быть значительно меньше, чем в стационарном случае. В качестве основного объекта исследования будет выступать кремний, сочетающий в себе как неоспоримую технологическую значимость и хорошую изученность (в стационарном случае), так и наличие «белых пятен» в его свойствах при высоком давлении и температуре (так его фазовая диаграмма при высоких давлениях известна весьма условно). При высоком давлении в кремнии наблюдается более 13 различных фазовых переходов, причем в зависимости от внешних условий могут наблюдаться различные «пути» фазовых превращений. С точки зрения технологии наибольший интерес представляют полиморфные фазы кремния, стабильные/метастабильные при нормальных условиях. Отдельный интерес также представляет исследование обратимых деформационных процессов, вызванных фотоиндуцированными явлениями, в частности объемным фотовольтаическим эффектом. Динамика этого процесса в настоящий момент недостаточно хорошо изучена, и представляет интерес с точки зрения фундаментальной науки. В качестве объектов для исследования наиболее перспективными являются кристаллы, демонстрирующие ярко выраженный фотовольтаический эффект, в частности,

модернизированные кристаллы ниобата лития (примесь железа, кислородные вакансии). В рамках проекта планируется восстановить временную динамику кристаллической решетки при лазерном воздействии на образец, используя рентгеновскую диагностику. В результате впервые в России будет проведена суб-нс время-разрешенная рентгеновская диагностика лазерно-индуцированных структурных изменений в конденсированной среде. На настоящий момент на территории РФ подобные эксперименты можно проводить только в НИЦ «Курчатовский институт», так как других фазовосинхронизированных лазерно-синхротронных комплексов не существует. Эксперименты будут поддержаны компьютерным моделированием, используя молекулярную динамику в сочетании с двух-температурной моделью. Данный подход позволяет успешно моделировать лазерное воздействие на конденсированную среду, включая фазовые переходы, распространение ударных волн, образование остаточных модификаций. Также в проекте будет проводиться *post-mortem* диагностика лазерного воздействия на образец, для того чтобы обнаружить и охарактеризовать новые фазы, а также оптимизировать процесс их получения.

Связь нано- и микроструктурных особенностей строения почв: от репрезентативности к многомасштабной цифровой модели

Головная организация: Почвенный институт имени В.В. Докучаева, г. Москва

Руководитель: Абросимов Константин Николаевич, кандидат географических наук

Область знания: Биология и науки о жизни

Аннотация

Предлагаемый Проект направлен на решение научной проблемы исследования внутренней связи структуры почвы на разных уровнях – нано- и микроуровне, что позволит впервые установить возможные зависимости в структуре на этих иерархических уровнях. В рамках Проекта будут проведены фундаментальные экспериментальные и методические исследования:

1. Создание методики исследования и совмещения данных при исследовании структуры почв на микро и наномасштабах методами рентгеновской микротомографии (КТ) и малоуглового рассеяния (МУР);
2. Исследование микро и наностроения значительной библиотеки образцов почв России;
3. Поиск стационарных и репрезентативных областей на двух и совмещенных масштабах;
4. Установление связи между наноструктурой почвы и ее микроструктурой.

Эти новые данные потенциально позволяют решить целый спектр ключевых задач: понять и объяснить многие почвенные процессы, а также впервые совместить микро и наномасштаб в единые изображения структуры и описать их с помощью многомасштабной цифровой модели почвенного строения. Значимость и актуальность Проекта определяются в первую очередь получением новых знаний об объемной структуре почв на наноуровне со скоростью и объемами исследований, недоступными для РЭМ методов. Более того, использование предложенных методик на основе данных малоуглового рассеяния на почвах позволяют исследовать образцы различной влажности. Совмещение данных томографии (микроуровень) и малоуглового рассеяния (наноуровень) и создание объемной модели почв погоризонтно с зонами переходов – это ключ к пониманию физических процессов, происходящих на пока недоступном для исследования уровне структурной организации. Результаты Проекта дадут возможность их математического описания и моделирования. Также, у нас появится возможность оценки изменений свойств структуры на микро и наноуровне при известных негативных процессах – таких как химическое загрязнение почв, снижение содержания гумуса, антропогенное уплотнение и др. Таким образом, успешное выполнение Проекта, как ожидается, приведет к новым возможностям объяснения процессов и функций почв где наноструктура играет также ключевую роль – массоперенос загрязнений и удобрений в почвах, жизнедеятельность микроорганизмов, удержание влаги, динамика структуры почвы при набухании-усадке и многим другим. Поставленные в рамках Проекта задачи и предлагаемые к их решению подходы обладают высокой степенью научной новизны, которая обусловлена сразу несколькими факторами:

1. Новизна используемых методик – сочетания МУР и КТ исследований для описания совмещенных нано- и микроструктуры почвы на обоих масштабах. Впервые будет проведена верификация исследования нанопористости в почвах на основе сравнения с результатами FIB-SEM исследований. Впервые будет построено 3D совмещенное изображение строения почвы на обоих масштабах для широкого набора почв России.

2. Новизна объектов исследования. Большинство российских естественных и сельскохозяйственных почв никогда не исследовались на наноуровне с разрешениями до нескольких нм, кроме классических РЭМ сколов. Таким образом, впервые КТ исследования будут систематически дополнены МУР-исследованиями наноструктуры почвы.

3. Новизна поставленных при исследовании этих объектов задач. Впервые будут исследованы корреляции между нано- и микроструктурой почв, стационарность и репрезентативность структуры почвы на микро и наномасштабах. В такой постановке исследовательская работа, предлагаемая нами в проекте, является абсолютно новой и никем до настоящего времени не проводившейся.

Публикации по теме работы

Cherkasov A., Gerke K. M., Khlyupin A. Towards effective information content assessment: Analytical derivation of information loss in the reconstruction of random fields with model uncertainty // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2024. – Т. 633. – P. 129400.

Новые наночастицы с производными клозо-боратных анионов как перспективные препараты бор-нейтронозахватной терапии злокачественных опухолей

Головная организация: Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, г. Москва

Руководитель: Кубасов Алексей Сергеевич, кандидат химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Бор-нейтронозахватная терапия (БНЗТ) привлекает значительное внимание исследователей как метод лечения рака, который не снижает существенно качество жизни пациентов. При этом для обеспечения эффективности БНЗТ необходимо достаточное накопление бора в клетках опухоли, и в настоящее время активно изучаются способы реализации этого аспекта. Перспективным направлением в области доставки лекарственных веществ являются самособирающиеся наноструктуры на основе липидов и их производных, например, липосомы, мицеллы низко- и высоко-молекулярных поверхностно-активных веществ и др. Кластерные анионы бора обладают рядом специфических свойств за счет ароматического характера аниона и делокализации поверхностного заряда, благодаря чему способны образовывать специфические слабые взаимодействия с донорами протонов [10.1016/j.molstruc.2021.130591. 10.1002/chem.202002123], которые могут как стабилизировать, так и дестабилизировать гидрофобный слой амфифильных компонентов самособирающихся структур. Это может препятствовать получению систем доставки бора для БНЗТ.

Взаимодействие свободных кластерных анионов бора с мембраной клеток и возможность их проникновения в клетки-мишени также не изучена. Изучение и обобщение данных по взаимодействию клозо-боратных анионов с самособирающимися наноструктурами на основе липидов и/или с фосфолипидами клеточных мембран позволит упростить выбор перспективных для БНЗТ производных бора и подходящих систем их доставки в клетки-мишени. Возможность введения экзо-полиэдрических заместителей позволяет широко варьировать свойства клозо-боратных анионов, например, повышая или понижая их липофильность. Благодаря изучению ряда таких производных можно предложить модели их взаимодействия с мембранами клеток и самособирающимися структурами для их доставки. Широкого исследования данных процессов в настоящее время не проводилось, однако данной области уделяется все больше и больше внимания [NNT: 2020ENCМ0004].

Настоящая работа будет посвящена исследованию влияния заместителей в сульфониевых $[B_{10}X_9SR_2]^-$ ($X = H, Cl, Br, R = Bu, Oct, C_{12}H_{25}, C_{18}H_{37}$) и аммониевых $[B_{10}X_9SR_3]^-$ ($X = H, Cl, Br, R = Bu, Oct, C_{12}H_{25}, C_{18}H_{37}$) производных клозо-декаборатного аниона на их взаимодействие с липидами и липидными слоями. В частности, исследованию межмолекулярного взаимодействия солей сульфониевых производных клозо-декаборатного аниона с моделями клеточных мембран на основе монослоев Ленгмюра методами стоячих рентгеновских волн (XRSW), рентгенофлуоресцентного анализа в геометрии полного внешнего отражения TXRF и рентгеновской дифракции в скользящей геометрии GID. А также исследованию возможности включения клозо-де-

каборатного аниона в липидные самособирающиеся структуры для получения новых систем доставки бора в клетки, как перспективных препаратов для БНЗТ.

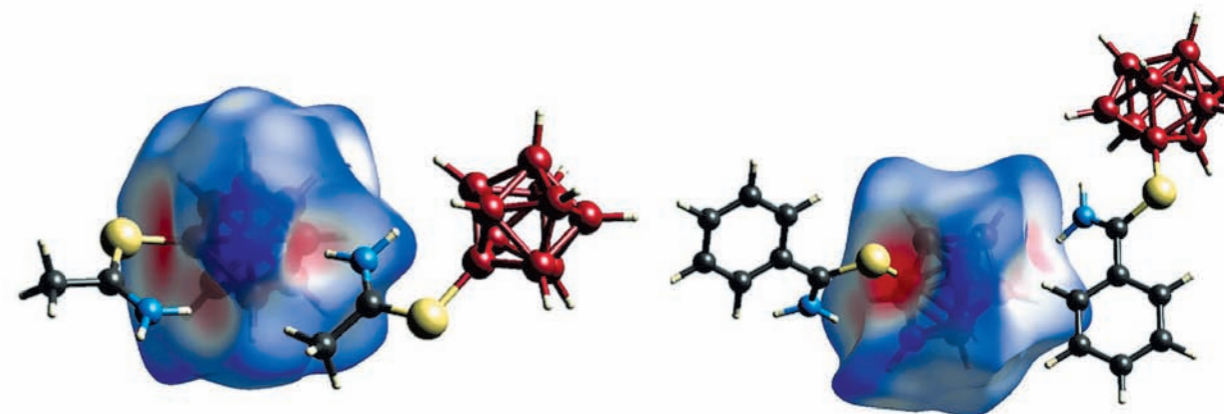


Рисунок 3.16. – Поверхности Хиршфельда борных остовов $B_{10}H_9$ в анионах исследованных соединений

Публикации по теме работы

Голубев А. В. и др. Синтез новых иминовых производных сульфонио-клозо-декаборатного аниона $[Bu_4N][2-B_{10}H_9SC(NH_2)R]$ ($R = -CH_3, -CH_2CH_3, -CH(CH_3)_2, -Ph, -PhCH_3$) // *Zurnal neorganiceskoj himii*. – 2023. – Т. 68. – № 12. – С. 1731-1739.

Применение и развитие методов резонансной рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии для изучения локальных электронных характеристик многокомпонентных функциональных материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием

Головная организация: Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, Свердловская обл.

Руководитель: Кузнецова Татьяна Владимировна, кандидат физико-математических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Проект направлен на решение фундаментальной научной задачи физики конденсированного состояния – установление взаимосвязи электронной структуры и свойств многокомпонентных функциональных материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием, включающей локализованный и коллективизированный аспекты поведения f- и d- электронов и их взаимодействие между собой, в результате которого формируется электронная и магнитная структура соединения. Кроме того, исследование направлено на совершенствование современных синхротронных методов резонансной фотоэмиссионной спектроскопии (RPES), в том числе межатомной и многоатомной фотоэмиссии, с целью развития описания многоэлектронных возбуждений при рентгеновском поглощении и фотоэмиссии. Будет получен ответ на фундаментальный вопрос: возможен ли фотоэффект с выбросом электронов из внутренних уровней соседних элементов, окружающих поглотивший квант атом. Предполагается, что такой межатомный фотоэффект существует и имеет значительную вероятность, особенно, в соединениях с элементами, содержащими сильно локализованные 4d-оболочки. Внутриатомное и межатомное спин-орбитальное взаимодействие, которое может усиливаться электрон-фононным взаимодействием, индуцирует расщепление спектра электронных возбуждений по спине. В проекте будут рассмотрены и экспериментально верифицированы механизмы межатомных переходов. В результате будет получено описание возбужденных состояний, возникающих в веществе при поглощении рентгеновских квантов, их эволюция, характерное время жизни, вероятность различных каналов распада. Теоретическое и экспериментальное изучение таких состояний представляет фундаментальный интерес для физики взаимодействия излучения с веществом. Прикладное значение будет иметь измерение энергии двухдырочного конечного состояния для экспериментального определения величины внутриатомного отталкивания электронов – основного параметра огромного большинства теоретических моделей, описывающих свойства твердых тел. Поставленная задача может быть решена только благодаря наличию и доступности синхротронного излучения в диапазоне до 1,3 кэВ. Наличие дополнительных методов исследования поверхности, таких как атомносиловая микроскопия (АСМ), сканирующая туннельная микроскопия (СТМ) непосредственно на синхротронной линии НаноФЭС («КИСИ-Курчатов»), позволяет одновременно изучать электронную структуру, морфологию поверхности, локальное химическое окружение атомов. В проекте предполагается разработка с последующей реализацией на синхротронах в РФ («КИСИ-Курчатов»

и СКИФ) нового перспективного метода изучения локальной проводимости полупроводниковых структур и тонких пленок с помощью рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии при включении / выключении лазерного воздействия (XPS+laser, Operando XPS). Наведенная лазером фотопроводимость обеспечивает быструю релаксацию возбужденных состояний в полупроводниковых структурах, проявляющуюся в сдвиге энергии связи внутренних уровней. Данный метод имеет огромный потенциал и используется в нескольких зарубежных лабораториях, в которых осуществляется синтез и исследования полупроводниковых структур и материалов для солнечных батарей.

Механо- и фотоиндуцируемые переключения в монослоях Ленгмюра на межфазных границах и их связь с функциональными характеристиками 2D материалов

Головная организация: Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, г. Москва

Руководитель: Селектор София Львовна, доктор химических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Проект направлен на создание интеллектуальных двумерных наноматериалов на основе новых переключаемых соединений различной химической природы. Оригинальность предлагаемого подхода заключается в том, что управление функциональными характеристиками наноустройств осуществляется за счет структурных превращений, индуцируемых поверхностью и управляемых латеральным сжатием и / или облучением. Актуальность поиска новых эффективных переключаемых наноматериалов определяется потребностями современного общества в области экологии, биологии, медицины и производства. Организованные планарные системы – перспективное направление разработки быстродействующих информационных устройств. Важнейшая задача проекта – выявление механизмов реализации молекулярных переключений в планарных системах. Для этого запланировано комплексное изучение изменения структуры переключаемых двумерных систем под воздействием таких факторов как латеральное сжатие-растяжение, изменение состава субфазы, присутствие в монослое дополнительных структурообразующих компонентов, а также фото-, УФ и рентгеновское облучение. В проекте предусмотрены уникальные эксперименты мирового уровня – одновременное проведение *in situ* измерений рентгеновскими методами и разработанным авторами проекта методом электронной спектроскопии поглощения при отражении, что позволит определить структурные характеристики взаимопереклюаемых форм исследуемых соединений и соответствующие им условия формирования. Решение таких задач возможно только с применением яркого источника рентгеновского излучения и доступных на ОИ современных высокочувствительных методов исследования. Для дифильных сопряжённых органических соединений нескольких химических классов (тетрапирролы, спиropираны, производные BODIPY, неионогенные ПАВ, флуороионофоры) с помощью методов, доступных на ОИ (малоугловой рентгеновской рефлектометрии и дифракции в геометрии скользящего пучка, метода стоячих рентгеновских волн и спектроскопии XANES), будут определены закономерности структурообразования в ультратонких плёнках и выявлены взаимосвязи между структурой монослоя и функциональными характеристиками формируемой из него информационной системы. Особое внимание будет уделено изучению механизмов впервые обнаруженных авторами 2D эффектов: контролируемого поверхностным давлением обратимого внутримолекулярного переноса электрона с бисфталоцианинового лиганда на металл, спин-кроссовера при принудительной 2D супрамолекулярной сборке тетрапиррольных комплексов никеля и рутения, импринтинговой предорганизации хромоионофоров и фотомеханического эффекта в монослоях фотохромных соединений. Ещё одно направление проекта - изучение механизмов переключения

функциональной активности холестерин-липидных мембран для выявления связи их структурной организации с проявлением особых биофизических свойств и определения путей стабилизации везикулярных мембран. Обработка результатов измерений будет проводиться современными вычислительными методами молекулярного моделирования и молекулярной динамики. Предусмотрено восстановление распределения электронной плотности из данных рентгеновской рефлектометрии стохастическими вычислительными методами с использованием разработанного при участии авторов проекта эффективного алгоритма. Научная значимость проекта обусловлена тем, что для ряда систем различной молекулярной организации впервые с помощью самых современных методов исследования будут выявлены механизмы структурных, фотофизических и механохимических переключений, протекающих в монослоях Ленгмюра при различных внешних воздействиях. Полученные результаты обеспечат как оптимизацию функциональных характеристик исследуемых систем, так и возможность постановки новых конкретных задач направленного дизайна материалов с высокой эффективностью отклика на внешние переключающие воздействия.

Многофункциональные магнитные наноматериалы на основе оксидных систем для применения в биомедицине

Головная организация: Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», г. Москва

Руководитель: Щетинин Игорь Викторович, кандидат технических наук

Область знания: Химия и науки о материалах

Аннотация

Данный проект направлен на исследования многофункциональных магнитных наноматериалов, обладающих широким спектром возможных областей применения, таких как препараты для адресной доставки лекарств, магнитной гипертермии, применения в качестве контрастных агентов магнитно-резонансной томографии (МРТ), локальной и адресной лучевой терапии и др. В качестве основы предлагается использовать легированные оксидные системы на основе ферритов (в т.ч. гексаферритов), которые благодаря своей биологической совместимости привлекают всё большее внимание исследователей, разрабатывающих новые высокоэффективные материалы. В проекте предлагается использовать различные химические методы получения легированных наночастиц на основе ферритов для управления комплексом функциональных свойств с целью создания новых природоподобных материалов без которых невозможен переход к новым технологиям, персонализированной медицине, высокотехнологичному здравоохранению и технологиям здоровьесбережения. Для проведения тонких исследований катионного замещения в синтезируемых материалах необходимо применение мощных методов структурного анализа, в частности, методы нейтронной дифракции, которые успешно реализуются на станции нейтронной порошковой дифракции ДИСК исследовательского нейтронного реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт». В результате выполнения проекта будут установлены закономерности формирования структуры и магнитных свойств наночастиц на основе оксидных систем в зависимости от способа получения и легирования с целью адаптации для использования в биомедицинских приложениях. На основании полученных результатов будет разработан масштабируемый метод синтеза наночастиц на основе оксидных систем для промышленного получения материалов, перспективных для использования в биомедицине в качестве контрастных агентов, адресной доставки лекарств и гипертермии. В результате проведения исследований будут синтезированы новые функциональные материалы на основе магнитотвердых оксидных систем для применения в биомедицине в качестве двойных T1 и T2-контрастных агентов со значениями T2-релаксивности не менее 220 с-1 и высокими значениями T1-релаксивности. Разработаны модели влияния легирования и методов получения на структуру, фундаментальные и функциональные свойства оксидных систем на основе магнитотвердых гексаферритов преимущественно для биомедицинского применения с использованием первопринципных методов расчета с целью управления магнитными свойствами в оксидных системах, перспективных для использования в биомедицине в качестве контрастных агентов, адресной доставки лекарств и гипертермии. Будет разработан метод синтеза легированных многофункциональных гибридных наночастиц на основе оксидных систем, обладающих свойствами мультиферроиков, и результаты исследований влияния полученных наночастиц на выживаемость опухолевых клеток с применением внешнего магнитного и/или электрического полей.



Глава 4 Научно-техническое сопровождение реализации проектов класса «мегасайенс» на территории Российской Федерации

Глава 4

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ СОПРОВОЖДЕНИЕ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОЕКТОВ КЛАССА «МЕГАСАЙЕНС» НА ТЕРРИТОРИИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ.....131

Модернизация и ввод в эксплуатацию Технологического накопительного комплекса «Зеленоград».....133

Проект создания уникальной научной установки класса «мегасайенс» на о. Русский в Дальневосточном федеральном округе (УНУ «РИФ»).....136

Модернизация Курчатовского специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов», г. Москва.....140

Разработка и изготовление макета алмазного детектора положения и интенсивности рентгеновского пучка для принципиально нового перспективного источника «СИЛА»144

Модернизация и ввод в эксплуатацию Технологического накопительного комплекса «Зеленоград»

Технологический накопительный комплекс «Зеленоград» (ТНК «Зеленоград») представляет собой уникальный специализированный синхротронный источник научно-технологической направленности для развития принципиально новой микро- и нанoeлектронной компонентной базы, аддитивных технологий, технологий робототехники и искусственного интеллекта, а также научно-образовательного и производственного комплекса в целях освоения серийного производства разработок и подготовки кадров в самых передовых и прорывных областях техники и технологий.

ТНК «Зеленоград» ориентирован на промышленные исследования и разработку технологий в области микроэлектроники и полупроводников. Синхротрон позволит исследовать материалы на атомарном уровне, что важно для создания новых типов микроэлектронных устройств и улучшения существующих технологий.



Рисунок 4.1. – Предполагаемый внешний вид комплекса после реконструкции

Основные задачи, решаемые на установке ТНК «Зеленоград»:

- Разработка широкого спектра принципиально новых материалов для оптоэлектроники, фотоники, микроэлектроники, включая нитридные, кремний-углеродные, 3D-структуры, гибридные, биоподобные и искусственные биологические, в том числе для создания:
- миниатюрных СВЧ-электронных модулей для радиолокации, систем связи и телекоммуникаций новых поколений;
- систем-на-кристалле для высокоскоростной параллельной обработки данных в системах связи и ЦОДах;
- Развитие технологий МЭМС и 3D-интеграции, в том числе для бионических имплантируемых сенсорных устройств с обработкой получаемых сигналов;

- Создание принципиально новых структур и систем, включая гибридные, биоподобные и искусственные биологические;
- Создание микрофлюидных устройств для формирования элементов типа «лаборатория-на-кристалле», биочипов для проведения анализа ДНК, РНК и пр.;
- Создание энергоэффективных вычислительных нейроморфных систем на базе мемристорных устройств;
- Разработка энергетических технологий и устройств, основанных на принципах генерации энергии в живой клетке (биотопливные элементы);
- Создание материалов для аддитивных технологий, включая гибридные, биоподобные и искусственные биологические;
- Создание методической и инструментальной базы метрологического обеспечения принципиально новых технологических процессов;
- Исследование влияния широкого спектра воздействий (радиационные, электромагнитные, химические, биогенные) на эксплуатационные характеристики принципиально новых материалов, структур и систем, включая гибридные, биоподобные и искусственные биологические.
- ТНК «Зеленоград» будет оснащен современным ускорительно-накопительным комплексом, включающим:
 - Линейный ускоритель электронов с энергией электронов $E = 80 \div 100$ МэВ.
 - Промежуточный малый накопитель-бустер, позволяющий ускорять электроны от 80 до 450 МэВ.
 - Каналы транспортировки электронного пучка ЭОК-1 и ЭОК-2.
 - Большой накопитель с энергией электронов до 2.2 ГэВ – собственно источник синхротронного излучения, предназначенный для решения задач микро- и нанотехнологий и проведения аналитических исследований в диапазоне длин волн $0.02 \text{ нм} \div 200 \text{ нм}$.

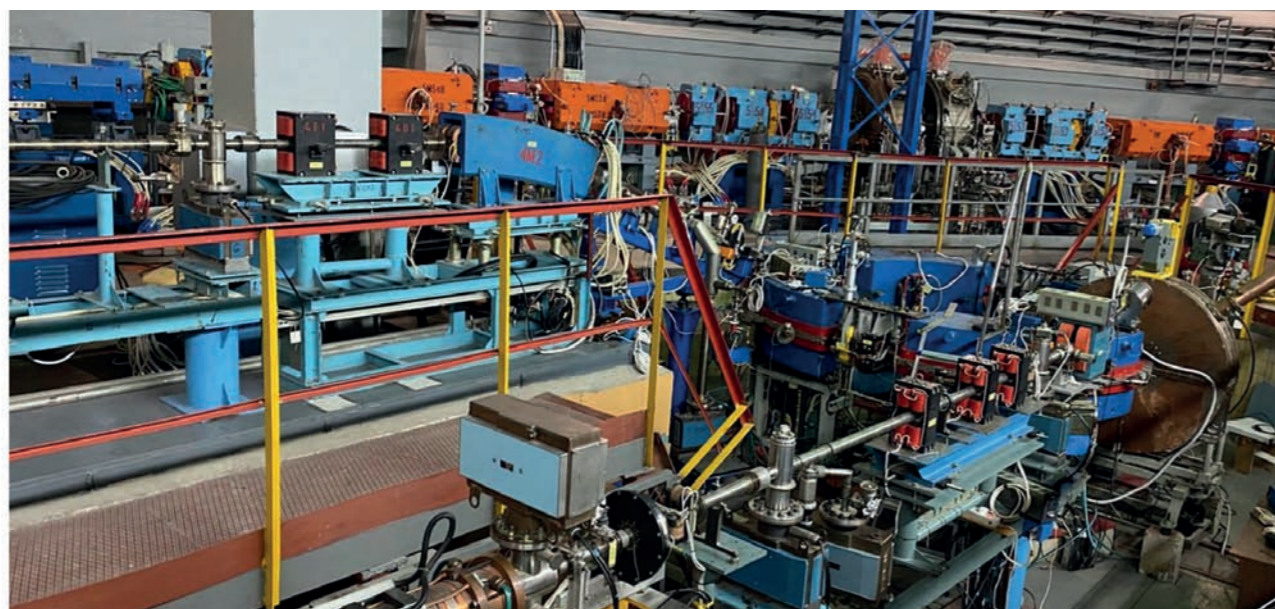


Рисунок 4.2. – Ускорительный зал ТНК «Зеленоград»

Основные технические характеристики ТНК:

№	Параметр	БН
1.	Рабочая энергия, ГэВ	1,6–2,2
2.	Максимальная энергия, ГэВ	2,2
3.	Ток, мА - одногустковый режим - многугустковый режим	100 300
4.	Магнитное поле в поворотных магнитах, Тл	0,425; 1,7
5.	Энергия инъекции, ГэВ ч	1,7
6.	Периметр, м	115,73
7.	Характеристическая длина волны СИ, Å	
	- из поворотных магнитов	10–20
	- из сверхпроводящих вигглеров	1–2
	- из литографических змеек	5–40
	- из ондуляторов	50–500

По итогам 2024 года:

1. Разработано техническое задание на выполнение проектных и изыскательских работ по реконструкции и модернизации ТНК «Зеленоград»;
2. Подготовлены уточненные технические требования, требования к документации, специальные и иные требования к узлам и системам ТНК «Зеленоград»;
3. Подготовлены частные технические задания на изготовление и монтаж узлов и систем, подлежащих ремонту, замене или восстановлению и техническому запуску;
4. Разработаны эскизные проекты: системы высокочастотного питания малого накопителя, системы высокочастотного питания большого накопителя, системы диагностики пучка, системы управления ускорительным оборудованием нижнего уровня ускорительного комплекса ТНК «Зеленоград»;
5. Определен перечень основных технических и функциональных решений для изготовления макетов узлов и систем ускорительно-накопительного комплекса ТНК «Зеленоград»;
6. Проведён анализ современных исследований, направленных на решение фундаментальных и прикладных задач, сопровождающих развитие экстремальной ультрафиолетовой литографии.

Проект создания уникальной научной установки класса «мегасайенс» на о. Русский в Дальневосточном федеральном округе (УНУ «РИФ»)

Создание уникальной научной установки класса «мегасайенс» на о. Русский в Дальневосточном федеральном округе (далее – УНУ «РИФ») предусмотрено:

- Указом Президента Российской Федерации от 25 июля 2019 г. № 356 «О мерах по развитию синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры в Российской Федерации» (с учетом изменений, внесенных Указом Президента Российской Федерации от 29 августа 2022 года № 590 и от 23 ноября 2023 года № 877).
- Мероприятиями Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019-2027 годы (далее Программа), утвержденной постановлением Правительства Российской Федерации от 16 марта 2020 г. № 287.
- Мероприятиями федерального проекта «Развитие инфраструктуры для научных исследований и подготовки кадров» национального проекта «Наука и университеты».
- Национальной программой социально-экономического развития Дальнего Востока на период до 2024 года и на перспективу до 2035 года, утвержденной распоряжением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2020 г. № 2464-р.

В составе проектируемого комплекса УНУ «РИФ» предусмотрены следующие здания и сооружения:

- Основное здание с синхротроном (общая площадь: 15188,5 м²). Здание представляет собой одноэтажное производственное здание круглой формы с диаметром 126 м с одно-, двух- и четырехэтажными встроенными и пристроенными частями. Высота здания составляет 25,35 м. Четырехэтажная (технологические, электротехнические и помещения вентиляции) и одноэтажная (тоннель большого накопителя и бустерного синхротрона) встройки в центре здания образуют ускорительно накопительный комплекс (УНК). Одноэтажная пристроенная часть основного здания с синхротроном состоит из био- и химических лабораторий, лабораторий пробоподготовки и помещений типовых лабораторий, электротехнических, вентиляционных, складов, мастерских, гардеробных, вспомогательных и служебных помещений, уборных и комнат отдыха и приема пищи для сотрудников. В двухэтажной пристроенной части располагаются вентиляционные камеры, помещение дежурной службы эксплуатации УНК, пультовая ВЧ, помещение аппаратной АСУТП/АИС/СС, радиопультовая и отдел системы автоматизированного управления УНК.
- Административный корпус (общая площадь: 4166,8 м²) – пристроенное к основному зданию с синхротроном четырехэтажное здание прямоугольной формы, с размерами 76,2x20,5 м (в осях) с помещениями столовой, медицинского пункта, гардеробами персонала, административными помещениями.
- Инженерный корпус (общая площадь: 947,5 м², в том числе площадь убежища: 157,1 м²) – здание для размещения центра обработки данных УНУ «РИФ», оборудования системы водяного охлаждения технологического оборудования синхротрона, другого инженерного оборудования.

- Криогенный корпус (общая площадь: 217,9 м²) – одноэтажное здание с площадкой для размещения оборудования для производства и хранения продуктов разделения воздуха.
- Контрольно-пропускной пункт (общая площадь: 78,0 м²) – расположенный у въездных ворот на территорию УНУ «РИФ».

Схема размещения объектов УНУ «РИФ» на земельном участке представлена на рисунке 4.3, а внешний вид объекта – на рис. 4.4.



Рисунок 4.3. – Визуализация размещения зданий и сооружений на участке проектирования

В течение 2024 года осуществлялось научно-техническое сопровождение реализации проекта УНУ «РИФ», в результате которого получены следующие результаты:

- технологическая карта с принципиальной схемой размещения технологического оборудования скорректирована с учетом изменений технологических и планировочных решений (рисунок 4.5.);

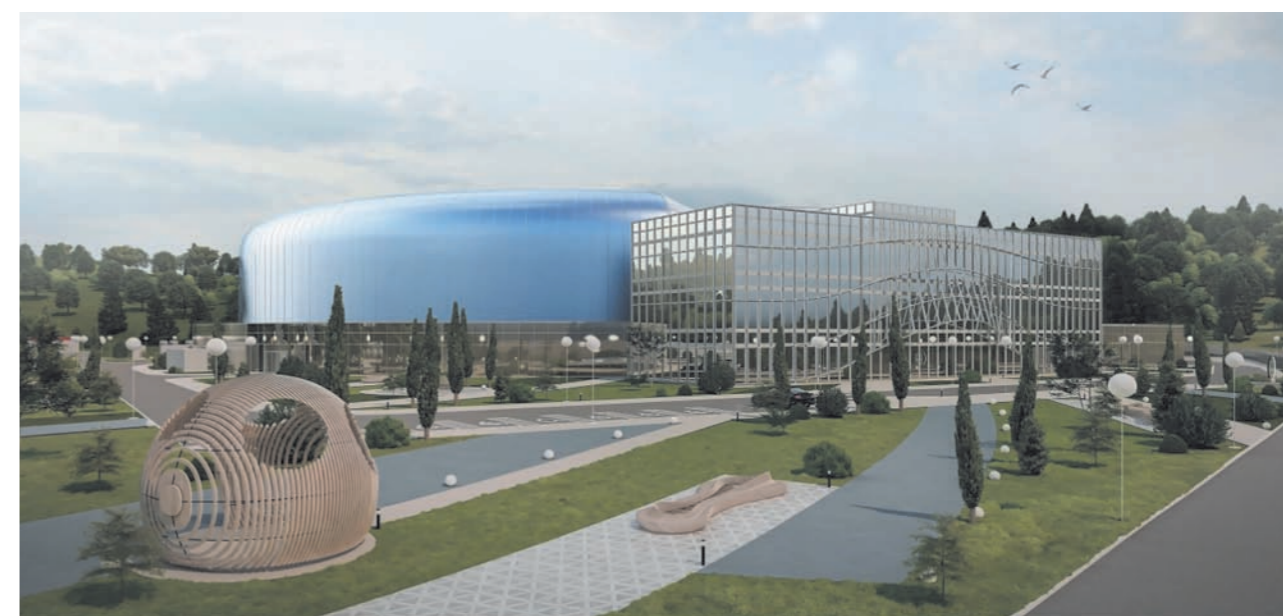


Рисунок 4.4. – Внешний вид проекта УНУ «РИФ»

- определены основные характеристики центра обработки данных, включая вычислительный кластер на процессорах и графических ускорителях;
- предложены технические решения по термостабилизации помещений с нестандартизированным оборудованием;
- разработаны частные технические задания на создание системы радиационного контроля, на разработку комплекса технических средств противокриминальной защиты, на создание автоматизированной системы управления технологическим процессом, на разработку объектовой локально-вычислительной сети, технологических систем контроля и управления доступом, видеонаблюдения технологической локально-вычислительной сети, центра обработки данных, на разработку системы блокировок и сигнализации;
- определены конструктивные решения по фундаменту основного здания на основании отчета по сейсмическому мониторингу;
- проектная и сметная документация по проекту рассмотрена и отправлена на государственную экспертизу.

Конструкция здания и биозащита спроектированы таким образом, чтобы иметь возможность размещения экспериментальных станций по всему периметру здания, в том числе в перспективе удаленных станций. Подготовлены исходные технические требования по экспериментальным станциям первой очереди, утвержденным на заседании рабочей группы Проектного комитета Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (протокол № ПРГ-1РИФ от 24.05.2023 г.):

1. Экспериментальная станция фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением со спиновой поляризацией (Spin-ARPES) и рентгеновским магнитным круговым дихроизмом (XMCD), источник синхротронного излучения (СИ) – ондулятор с эллиптической поляризацией. Спектральный диапазон – 68,6-920 эВ. Детектирующая система – 5-ти осевой крио манипулятор, 2 катушки электромагнитов с высокомоощными источниками питания, анализатор электронов с угловым и спиновым разрешением. Назначение: изучение электронной структуры и элементный анализ тонких поверхностных слоев.
2. Экспериментальная станция спектроскопии рентгеновского поглощения с возможностью реализации методик исследования протяженной тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (EXAFS), микрофокусировки, порошковой дифракции и рентгенофлуоресцентного анализа, источник СИ – поворотный магнит. Спектральный диапазон – 5-30 кэВ. Детектирующая система – полупроводниковый детектор рентгеновского излучения с энергетическим разрешением не хуже 200 эВ. Назначение: определение локальной атомной структуры около поглощающего атома и его зарядового состояния.
3. Экспериментальная станция визуализации с возможностью реализации метода иерархической фазово-контрастной томографии, источник СИ – шифтер (3-х полюсный вигглер). Спектральный диапазон – 10-100 кэВ. Детектирующая система – томограф с пространственным разрешением от 3 до 50 мкм. Назначение: получение томографии объектов и послойное изучение скрытой внутренней структуры объектов культурного наследия, визуализация объектов больших габаритов.

4. Экспериментальная станция рентгеновской дифракции с возможностью реализации методов монокристаллической и порошковой дифракций, источник СИ – поворотный магнит. Спектральный диапазон – 5-40 кэВ. Детектирующая система – дифрактометр, по параметрам не хуже, чем mardtb от фирмы MarXperts, позволяющий подстраиваться под пучок фотонов, устанавливать образец на пучок и проводить съемку при вращении оси φ гониометра с точностью в 0.002° и повторяемостью в 0.001° на шаг. Назначение: анализ кристаллической структуры материалов, определение фазового состава и атомного строения вещества с высоким разрешением.

Следует отметить, что практически каждая экспериментальная станция проекта «РИФ» будет иметь определенную специфику с учетом особенностей выбранных приоритетных направлений и научных задач, объектов исследований и наличия станций с аналогичными экспериментальными методиками на других мегаустановках, реализуемых в рамках ФНТП. Так, для станции фотоэлектронной спектроскопии на сегодняшний день аналоги в России отсутствуют, что позволит получать с ее помощью абсолютно уникальные результаты. Станция спектроскопии поглощения будет реализована в многопрофильном формате с возможностью применения дополнительных методов дифракции и элементного анализа вещества. Использование метода иерархической фазово-контрастной томографии позволит решить большинство задач, связанных с исследованием объектов культурного наследия, на мировом уровне.

В рамках подготовки кадров для реализации проекта УНУ «РИФ» в 2024 году в НИЦ «Курчатовский институт» были организованы 2 ознакомительные стажировки, а также впервые были проведены специализированные стажировки длительностью до 4-х недель с углубленным изучением выбранной технической системы синхротрона и стажировки ученых Молодежных лабораторий ДВФУ для проведения измерений на экспериментальных станциях синхротрона «КИСИ-Курчатов». Ознакомительные стажировки прошли в двух форматах: 2-х недельная стажировка студентов ДВФУ в количестве 9 бакалавров (2-4 курс) технических и научных направлений подготовки: машиностроение, автоматизация технологических процессов и производств, химия, физика и материаловедение; недельный интенсив в формате межрегиональной молодежной школы по синхротронным и нейтронным методам исследования «Мегасайенс Лаб» для 28 человек по двум трекам. В синхротронном треке приняли участие 22 обучающихся ДВФУ, а участниками нейтронного трека стали 6 студентов бакалавриата и магистратуры из СПбГУ, НИЯУ МИФИ и МАИ. Под руководством специалистов НИЦ «Курчатовский институт» специализированные стажировки прошли 10 обучающихся из ДВФУ, которые ранее участвовали в ознакомительных стажировках. Специализированная стажировка включала предметное изучение одной из технических систем: система электроснабжения синхротрона «КИСИ-Курчатов», экспериментальные станции Медиана, ЛИГА, Белок/РСА, Микрофокус, НаноФЭС, СТМ, а также была посвящена проектированию экспериментальных станций и ондуляторов. Ученые Молодежных лабораторий ДВФУ в количестве трех человек в рамках совместных научных проектов с НИЦ «Курчатовский институт» в 2024 году дважды очно проходили обучение по проведению измерений на экспериментальных станциях в ККСНИ и обработке полученных результатов.

Модернизация Курчатовского специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов», г. Москва

Модернизация Курчатовского специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов», г. Москва, предусмотрена Указом Президента Российской Федерации от 25 июля 2019 г. № 356 «О мерах по развитию синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры в Российской Федерации», мероприятиями Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры до 2030 года, утвержденной постановлением Правительства Российской Федерации от 16 марта 2020 г. № 287, а также мероприятиями федерального проекта «Развитие инфраструктуры для научных исследований и подготовки кадров» национального проекта «Наука и университеты».

Синхротрон «КИСИ-Курчатов» – единственный на постсоветском пространстве специализированный источник синхротронного излучения, являющийся самой востребованной установкой класса «мегасайенс» в России. На синхротроне ежегодно проводится большое количество структурных исследований в различных областях физики твердого тела, химии, материаловедения, биомедицины и культурного наследия. При этом, наряду со множеством работ по пользовательским заявкам сторонних организаций, значительную часть исследований составляют совместные работы с подразделениями и организациями НИЦ «Курчатовский институт».



Рисунок 4.5. – 3D модель большого накопителя и бустерного синхротрона «КИСИ-Курчатов» после модернизации

Глубокая модернизация источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» направлена на достижение уровня источника синхротронного излучения 3-го поколения. Свойства синхротронного пучка (яркость, стабильность, диапазон энергий) будут значительно улучшены, что откроет возможность для ре-

ализации широкого спектра экспериментальных задач по визуализации внутренней структуры твердого тела: от классического материаловедения, кристаллографии и структурной химии до задач микроэлектроники, молекулярной биологии и биомедицины. Особую значимость модернизированный синхротрон приобретает в качестве основного исследовательского инструмента Курчатовского комплекса nano-, био-, инфо-, когно-, социо- (НБИКС) природоподобных технологий, не имеющего мировых аналогов по экспериментальному оснащению и решаемым задачам.

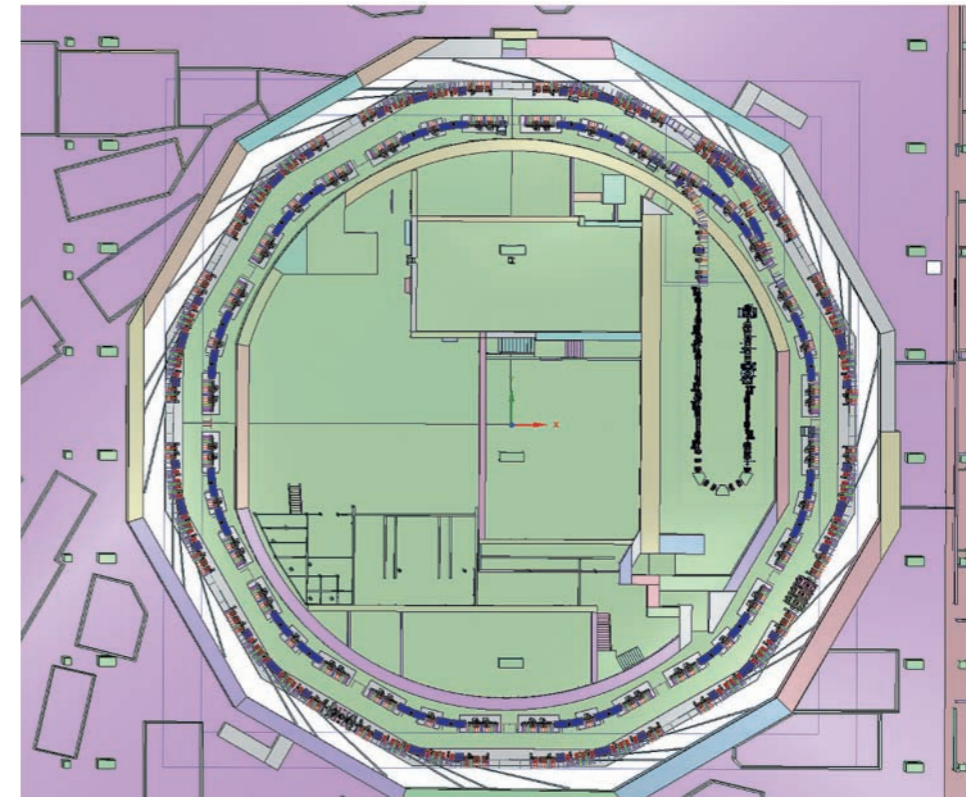


Рисунок 4.6. – Общая схема расположения основных элементов синхротронного комплекса после модернизации

В 2024 году в рамках научно-технического сопровождения проекта модернизации было подготовлено и согласовано техническое задание на выполнение полного цикла работ по проекту модернизации синхротрона «КИСИ-Курчатов», включая разработку рабочей документации, выполнение строительно-монтажных работ, ведение авторского надзора, а также разработку, изготовление, монтаж и проведение пусконаладочных работ технологического оборудования модернизированного ускорительно-накопительного комплекса. Техническое задание включает в себя требования к следующим основным этапам работы:

- Демонтаж большого накопителя Сибирь-2, малого накопителя Сибирь-1, линейного ускорителя электронов и старых электронно-оптических каналов, как выработавших свой эксплуатационный ресурс. Кроме того, будут демонтированы в бывшем ВУФ-зале четыре канала вывода СИ из накопителя Сибирь-1.
- Изготовление новых элементов ускорительно-накопительного комплекса:
- ЛУЭ на 200 МэВ, состоящий из 4 ускоряющих секций и предназначенный для получения электронных сгустков и их ускорения для последующей инжекции в БС (рисунок 4.8);

- ЭОК-1, предназначенный для перепуска электронов из линейного ускорителя в бустерный синхротрон с минимальными потерями пучка;
- БС, предназначенный для ускорения сгустков электронов от энергии, при которой они инжектируются из ЛУЭ до энергии БН, состоящий из 12 суперпериодов;
- ЭОК-2, предназначенный для перепуска электронов из БС в БН с минимальными потерями пучка при условии равной энергии накопленных электронов в БН и инжектируемых из БС;
- БН, предназначенный для накопления и сохранения электронных сгустков, инжектируемых из БС, поддержания их энергии и сохранения тока, генерации синхротронного излучения.
- Три излучающих устройства (2 ондулятора и 1 вигглер) для новых экспериментальных станций. Излучающие устройства устанавливаются в прямолинейные промежутки накопителя и предназначены для генерации синхротронного излучения с параметрами, превосходящими излучение из поворотных магнитов.
- Проведение строительно-монтажных и пусконаладочных работ изготовленного оборудования с учетом согласования с уже имеющимися устройствами и системами (резонаторы, ВЧ-генераторы, система вставных устройств (сверхпроводящие вигглеры), элементы каналов вывода излучения (фронтэнды), включая доработку и настройку имеющихся вставных устройств (вигглеров) для корректной работы с новой магнитной системой БН.
- Запуск нового синхротронного комплекса.

Подготовленное техническое задание легло в основу контракта между НИЦ «Курчатовский институт» и НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ на выполнение полного комплекса работ, а также договора НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ с Институтом ядерной физики СО РАН им. Г.И. Будкера на разработку, поставку и пусконаладку технологического оборудования и систем.

Совместно со специалистами ИЯФ СО РАН ведется разработка и согласование частных технических заданий на основные узлы и компоненты ускорительно-накопительного комплекса.

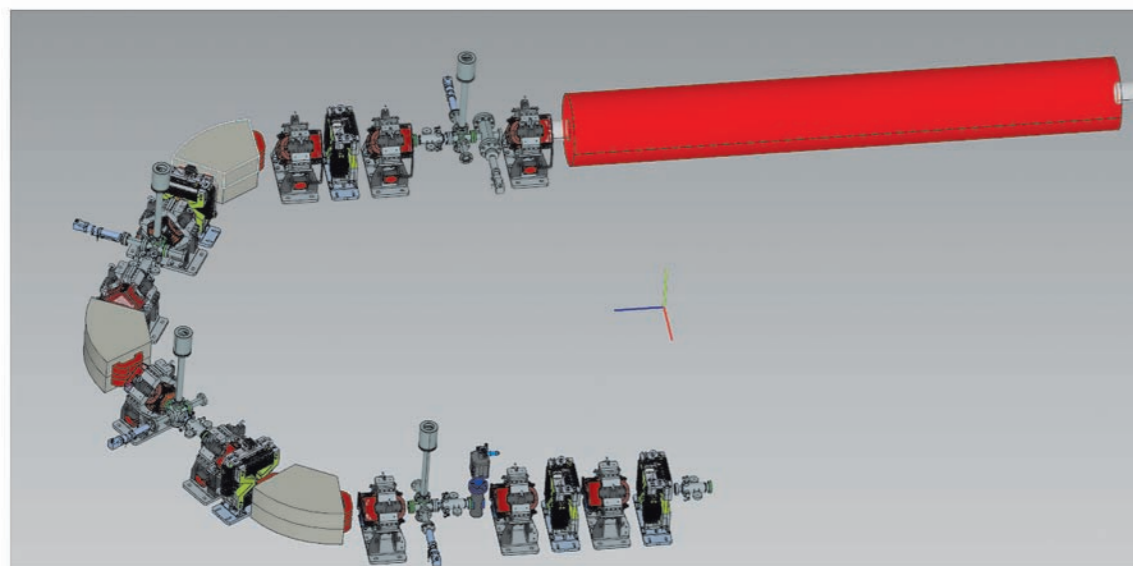


Рисунок 4.7. – 3D-модель нового линейного ускорителя, состоящего из 4х ускоряющих секций и включающий 180-градусный поворот, для обеспечения возможности расположения линейного ускорителя в существующем зале УНК

Таблица 4.1. – Основные параметры Курчатковского источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» «до» и «после» модернизации

Параметр	В настоящее время	После модернизации
Энергия, ГэВ	0.45-2.5	2.5
Периметр, м	124.130400	124.169642
Количество суперпериодов	6	6
Эмиттанс, нм-рад	97.7	5
Частоты бетатронных колебаний, ν_x / ν_y	7.78771 / 6.69652	17.1521 / 7.2091
Натуральный хроматизм, η_x / η_y	-16.7 / -12.8	-48.6 / -16.8
Потери энергии на оборот, кэВ	680.7	849
Времена затухания, $\tau_x / \tau_y / \tau_s$, мс	3.172 / 3.041 / 1.490	1.471 / 2.438 / 1.8117
Ток пучка электронов, мА	до 200	до 200
Время жизни, ч	20-30	бесконечно
Частота ВЧ, МГц	181.135599	181.078353
Кратность ВЧ	75	75
Количество промежутков для вставных устройств	до 5 вигглеров и до 4 ондуляторов (шифтеров)	до 9 вигглеров или до 9 ондуляторов
Общее количество экспериментальных станций	до 24 из ВМ и до 9 из ID	до 36 из ВМ до 9 из ID
Тип магнитной структуры	модифицированная DBA	модифицированная DBA
Коэффициент связи, %	от 1 до 10	от 1 до 100
Размер динамической апертуры по горизонтали, мм	±25	±20

Разработка и изготовление макета алмазного детектора положения и интенсивности рентгеновского пучка для принципиально нового перспективного источника «СИЛА»

Проекты многих экспериментальных станций создаваемого принципиально нового перспективного источника «СИЛА» предусматривают использование микро- и нанофокусировки излучения. Для применения передовых методик в экспериментах с рентгеновским излучением – от фундаментальных исследований до промышленного контроля – критически важно отслеживать два ключевых параметра: положение рентгеновского пучка и его интенсивность. При этом, мониторинг параметров пучка в режиме реального времени является критически важным требованием.

Для решения этой диагностической задачи в рамках работ по разработке прототипов основных узлов и систем перспективного комплекса «СИЛА» был спроектирован и реализован алмазный детектор положения и интенсивности рентгеновского пучка.

Ключевым элементом датчика является монокристаллическая пластина из искусственного алмаза. Выбор алмаза в качестве чувствительного материала детектора является принципиальным и обусловлен экстремальными условиями работы с мощным рентгеновским излучением. Обычные материалы, такие как кремний в полупроводниковых детекторах, подвержены быстрой деградации под воздействием радиации, теряя чувствительность и выходя из строя. Алмаз же обладает уникальным сочетанием свойств, делающих его идеальным для этой задачи. Он демонстрирует исключительную устойчивость к радиационным повреждениям, обеспечивая долгий срок службы даже при интенсивном облучении. Высокая теплопроводность алмаза позволяет эффективно отводить тепло, генерируемое мощным рентгеновским пучком, предотвращая перегрев и повреждение чувствительной области. Кроме того, алмаз обладает очень быстрым откликом, что дает возможность отслеживать быстрые изменения параметров пучка, и характеризуется низким уровнем собственных электрических шумов, что критически важно для точного измерения слабых сигналов.

Для обеспечения необходимых детекторных характеристик – высокой подвижности носителей заряда и низкого уровня шумов – алмаз должен обладать исключительной чистотой, соответствующей так называемому электронному классу (electronic-grade). Это означает минимальное содержание структурных дефектов кристаллической решетки и посторонних примесей (особенно азота и бора), которые могут захватывать носители заряда или создавать паразитные токи, ухудшая чувствительность и точность измерений. Для выращивания алмазов такого качества применялась технология CVD (Chemical Vapor Deposition – химического осаждения из газовой фазы). В этом процессе в специальной камере при контролируемых условиях (высокий вакуум, нагрев до 700-900°C) из газовой смеси, содержащей углеводороды (обычно метан, CH_4) и водород (H_2), на подложке послойно осаждаются атомы углерода, формируя монокристаллическую алмазную пленку. Использование метода CVD позволило: управлять чистотой кристалла, минимизируя включения примесей за счет высокой чистоты исходных газов и вакуумных условий, и получать крупные однородные пластины с заданной кристаллографической ориентацией, пригодные для изготовления детекторов.

Структура чувствительного элемента организована следующим образом: на одну сторону тонкой алмазной пластины нанесён сплошной слой металлизации, выполняющей роль общего электрода, на который подается электрический потенциал (рисунок 4.9).

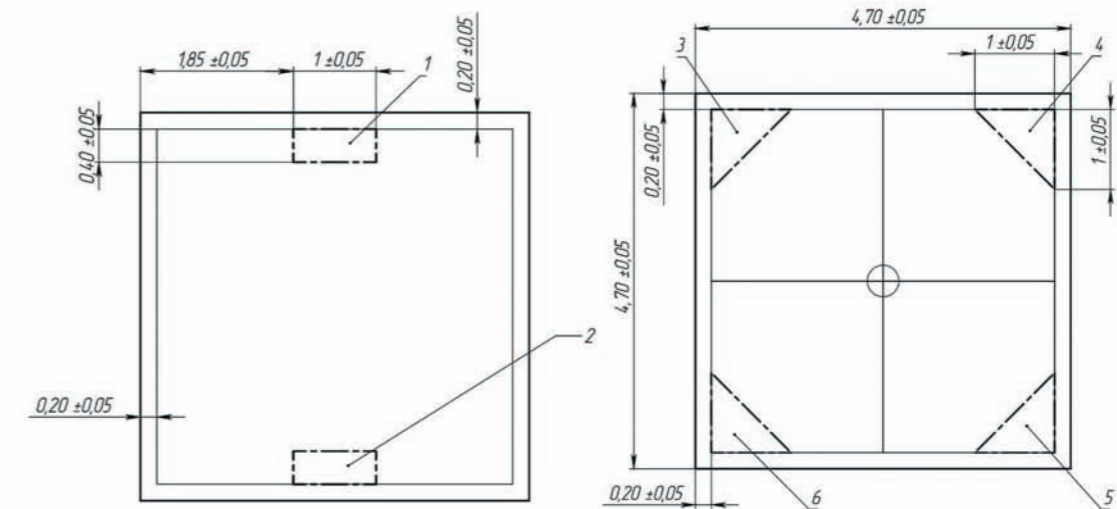


Рисунок 4.8. – Слева: структура сплошного электрода алмазного чувствительного элемента, числами 1 и 2 указаны области нанесения золотого высокопроводящего электрода. Справа: квадрантная электродная структура алмазного чувствительного элемента, числами 3-6 указаны области нанесения золотого высокопроводящего электрода

Для обеспечения надежного электрического контакта и долговечности работы датчика, формирование металлизированных электродов на поверхности алмазной пластины выполнялось в два этапа. Первый слой наносимого металла – титан. Титан выбран благодаря своей исключительной адгезии к поверхности алмаза, благодаря формированию карбида титана, обеспечивает прочное механическое сцепление и стабильную электрическую связь. Поверх титанового слоя наносился слой золота. Золото выполняет несколько ключевых функций: оно служит высокопроводящим материалом для эффективного съема тока, защищает нижележащий титан от окисления и обеспечивает низкое контактное сопротивление при подключении внешних цепей. Такая двухслойная структура (Ti/Au) гарантирует как надежное крепление металлизации к алмазу, так и оптимальные электрофизические свойства электродов. На противоположную сторону алмазной пластины наносилась металлизация, структура которой образует четыре независимых квадратных электрода, изолированных друг от друга (рисунок 4.9), формируя тем самым квадранты для снятия фототока. Для этого после нанесения двух слоёв металлов (Ti/Au) на активной стороне алмазной пластины вытравливался очень тонкий (5 мкм) изолирующий крестообразный паз, разделяющий металлизацию на четыре независимых квадратных электрода.

Работа датчика основана на преобразовании энергии рентгеновских фотонов в электрический заряд. Когда рентгеновский пучок проходит через алмазную пластину, фотоны поглощаются атомами кристаллической решетки алмаза. Это взаимодействие выбивает электроны, создавая пары свободных носителей электрического заряда: электроны и дырки. Подаваемое на сплошной электрод напряжение создает внутри алмаза электрическое поле. Под действием этого поля заряд устремляется к четырем квадратным электродам на противоположной стороне. Величина электрического тока, снимаемого с каждого из четырех квадратных электродов,

прямо пропорциональна количеству носителей заряда, достигших именно этого электрода, а значит, и интенсивности той части рентгеновского пучка, которая освещала область, принадлежащую данному электроду.

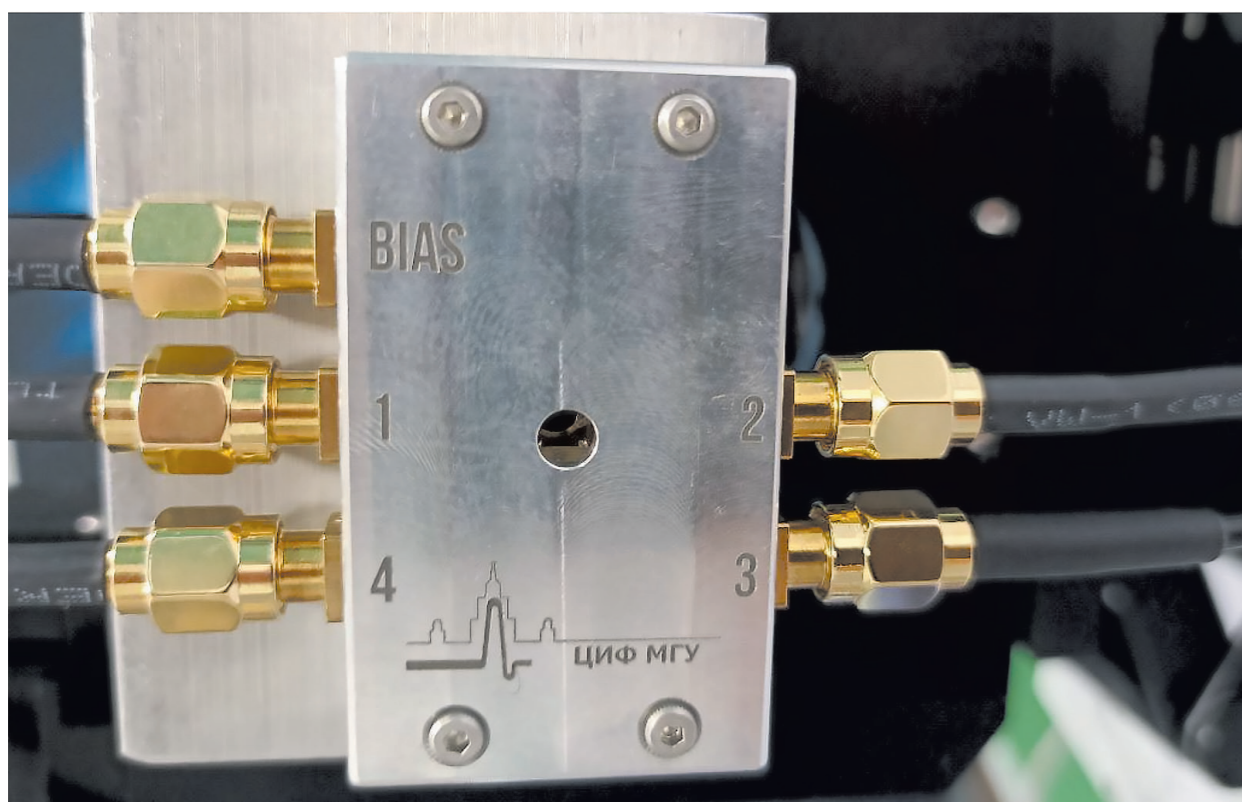


Рисунок 4.9. – Готовый алмазный датчик положения и интенсивности пучка

Расчет ключевых параметров пучка основан на анализе токов с этих четырех электродов. Для определения общей интенсивности рентгеновского пучка, попавшего на активную зону датчика, достаточно просуммировать величины токов со всех четырех электродов. Суммарный ток является мерой полного количества носителей заряда, созданных излучением во всей пластине, что эквивалентно полной интенсивности пучка.

Определение точного положения центра пучка осуществляется с помощью метода центра масс. Положение центра пучка вдоль горизонтальной оси (координата X) рассчитывается на основе разницы токов, измеренных левой и правой парой электродов. Аналогично, положение вдоль вертикальной оси (координата Y) определяется разницей токов от верхней и нижней пары электродов. Анализируя эти соотношения токов, вычисляются координаты центра пучка с высокой точностью, которая значительно превосходит размер самих электродов и ширину разделяющего их крестообразного паза.

Для преобразования слабых фототоков, снимаемых с четырех квадратных электродов алмазного датчика, в цифровые сигналы, пригодные для точного расчета положения и интенсивности пучка, был разработан и реализован специализированный блок обработки сигналов - система мониторинга пучка (рисунок 4.10). Также система мониторинга пучка решает задачи подачи напряжения смещения на сплошной электрод и передачи обработанных данных в автоматическую систему управления (АСУ) синхротронной станции.

Основной принцип работы блока заключается в следующем. Каждый из четырех токовых сигналов с электродов алмазного датчика подается на высокоточный малошумящий усилитель тока (трансимпедансный усилитель).

Ключевым элементом здесь являются прецизионные резисторы обратной связи в этих усилителях. Именно на этих резисторах происходит падение напряжения, пропорциональное величине входного фототока. Таким образом, слабые токи преобразуются в более удобные для дальнейшей обработки напряжения. Применение прецизионных резисторов позволяет добиться точной регистрации малых токов вплоть до величин порядка 1 пА.

Полученные аналоговые напряжения с выходов четырех трансимпедансных усилителей подаются на входы высокоскоростных аналого-цифровых преобразователей (АЦП). АЦП преобразуют непрерывные аналоговые напряжения в дискретные цифровые коды с высокой частотой дискретизации, необходимой для работы в режиме реального времени.



Рисунок 4.10. – Внешний вид и внутреннее устройство блока системы мониторинга пучка

Дальнейшая цифровая обработка (фильтрация шумов, вычисление суммы токов для интенсивности и разностей токов для координат X и Y по методу центра масс) выполняется программируемой логической схемой (ПЛИС). Итоговые цифровые значения интенсивности (I) и координат положения пучка (X, Y) передаются в АСУ экспериментальной станции. Физическое подключение к сети АСУ осуществляется через разъем RJ-45 (Ethernet).

Таким образом, разработанное устройство позволит проводить диагностику зондирующего пучка на экспериментальных станциях перспективного источника «СИЛА» в режиме реального времени, значительно увеличивая точность локализации излучения и сокращая длительность подстройки параметров. Также, благодаря возможности непрерывного мониторинга положения пучка в режиме реального времени, алмазный датчик обеспечит значительное сокращение длительности процедур подстройки параметров ускорителя, необходимых для стабилизации пространственных характеристик зондирующего излучения.



Глава 5 Список публикаций сотрудников комплекса

Глава 5

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОТРУДНИКОВ КОМПЛЕКСА	149
Материаловедение.....	151
Биомедицинские исследования.....	157
Культурное наследие	158

Материаловедение

1. **Kovalchuk M.V., [et al.], Marchenkov N.V., Blagov A.E.** Subnanosecond X-ray Diffraction Technique for the Study of Photoinduced Polarization-Dependent Processes on the KISI-Kurchatov // *Crystallography Reports*. – 2024. – V. 69. P. – 165-171.
2. **Vorovitch M.F., Samygina V.R., Konarev P.V., Peters G., Kovalchuk M.V.** Preparation and characterization of inactivated tick-borne encephalitis virus samples for single-particle imaging at the European XFEL // *Acta Crystallographica Section D: Structural Biology*. – 2024. – V. 80. – P. 44-53.
3. **Kosmachevskaya O.V., Novikova N.N., Yakunin S.N., Topunov A.F.** Formation of Supplementary Metal-Binding Centers in Proteins under Stress Conditions // *Biochemistry (Moscow)*. – 2024. – V. 89. – P. S180-S192.
4. **Subbotin I.A., Pashaev E.M., [et al.], Belyaeva A.O., Kondratiev O.A.** Orientational and crystallographic relationships in thin films of yttrium orthoferrite on sapphire substrates // *Acta Crystallographica Section B*. – 2024. – V. 80. – P. 340-348.
5. **Karpov I.D., Em V.T., [et al.]** Investigation of Residual Stresses in Steel Plates after Shot-Impact Treatment by Spatial Resolution Neutron Diffraction // *Physics of Metals and Metallography*. – 2024. – V. – 125. – № 12. – P. 1482-1490.
6. **Marchenkov N., Mareev E., Kulikov A., [et al.]** Hybrid Approach for Multiscale and Multimodal Time-Resolved Diagnosis of Ultrafast Processes in Materials via Tailored Synchronization of Laser and X-ray Sources at MHz Repetition Rates // *Optics*. – 2024. – V. 5. – P. 1-12.
7. **Averyanov D.V., [et al.], Kondratev O.A., Yakunin S.N.** Breakdown of rotational invariance in cube-on-cube epitaxy of rock-salt oxides on Si and Ge // *Surfaces and Interfaces*. – 2024. – V. 45. – P. 103919.
8. **Kozlov I.V., Svetogorov R.D.** Advanced structure research methods of amorphous $\text{Co}_{69}\text{Fe}_4\text{Cr}_4\text{Si}_{12}\text{B}_{11}$ microwires with giant magnetoimpedance effect: Part 3 - Cluster growth and crystal nucleation // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2024. – V. 997. – P. 174953.
9. **Bilyachenko A.N., Khrustalev V.N., Dorovatovskii P.V., [et al.]** Fe(III)-Based Phenylsilsesquioxane/Acetylacetonate Complexes: Synthesis, Cage-like Structure, and High Catalytic Activity // *Inorganic Chemistry*. – 2024. – V. 63. – P. 1909-1920.
10. **Rajakumar K., Nekorysnova N.S., Dorovatovskii P.V., [et al.]** Enhancement of intermolecular aggregation on solvent-influenced strong hydrogen-bonded single crystal // *Luminescence*. – 2024. – V. 39. – P. e4678.
11. **Korablev G.G., Dorovatovskii P.V., [et al.]** Halogen Bonds in the Structure of Tetrabromophenylbutane // *Journal of Structural Chemistry*. – 2024. – V. 65. – P. 75-84.
12. **Kramarova E.P., Dorovatovskii P.V.** An expedient synthesis of a picolinamide-based betain bearing a 3-sulfonatopropyl substituent // *Mendeleev Communications*. – 2024. – V. 34. – P. 126-128.
13. **Shuvaeva V.A., [et al.], Veligzhanin A.A., Svetogorov R.D., Khramov E.V., [et al.]** Synthesis and properties of nano-cadmium oxide and its size-dependent responses by barley plant // *Environmental Research*. 2024. V. 246. P. 118045.
14. **Skorynina A.A., [et al.], Khramov E.V., Veligzhanin A.A., [et al.]** Synthesis and characterization of two novel Schiff base Pd(II) complexes based on 3,5-Diiodo- and 3,5-Dibromosalicylaldehydes // *International Journal of Thin Film Science and Technology*. – 2024. – V. 13. – P. 1-10.
15. **Sorokovikov M.N., [et al.], Seregin A.Y., [et al.], Blagov A.E., [et al.]** Submicron Focusing of X-rays by Silicon Planar Compound Refractive Lenses // *Nanobiotechnology Reports*. – 2024. – V. 18. – P. S10-S15.

16. **Shaposhnikov R., [et al.], Yakunin S., Borisov M.** Investigation of structural and reflective characteristics of short-period Mo/B4C multilayer X-ray mirrors // *Journal of Synchrotron Radiation*. – 2024. – V. 31. – P. 268-275.
17. **Dashkov A.S., Vasiliev A.L., Yakunin S.N.** An advanced theoretical approach to study super-multi-period superlattices: theory vs experiments // *Journal of Semiconductors*. – 2024. – V. 45. – P. 022701.
18. **Shkvarin A., Lebedev A., Chumakov R.** Electronic and Crystal Structure of New CrxZrSe₂ Intercalation Compounds // *Inorganic Chemistry*. – 2024. – V. 63. – P. 934-943.
19. **Burlov A.S., Lazarenko V.A., Trigub A.L.** Zinc Complexes of Fluorosubstituted N-[2-(Phenyliminomethyl)phenyl]-4-methylbenzenesulfamides: Synthesis, Structure, Luminescent Properties, and Biological Activity // *Materials*. – 2024. – V. 17. – P. 438.
20. **Popov V.V., [et al.], Kulikova E.S., Khramov E.V., Kolyshkin N.A.** Effects of synthesis conditions on the crystal and local structures of high-entropy oxides Ln₂M₂O₇ (Ln = La-Yb, Y; M = Ti, Zr, Ce) // *Ceramics International*. – 2024. – V. 50. – P. 5319-5328.
21. **Batova T.I., [et al.], Khramov E.V., [et al.]** Oxidative carbonylation of methane into acetic acid: Effect of metal (Zn, Cu, La, and Mg) doping on Rh/ZSM-5 activity // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2024. – V. 366. – P. 112953.
22. **Kapustina A.A., [et al.], Lazarenko V.A., [et al.]** Copper (II) coordination compounds based on bis-hydrazones of 2,6-diacetylpyridine: synthesis, structure, and cy-toxic activity // *Dalton Transactions*. – 2024. – V. 53. – P. 3330-3342.
23. **Albrekht Ya.N., [et al.], Lazarenko V.A., [et al.]** Synthesis and photophysical studies of a new benzimidazole derivative and its zinc(II) complexes // *Journal of Luminescence*. – 2024. – V. 266. – P. 120286.
24. **Biktimirov A., [et al.], Lazarenko V.A.** Crystal structure of GTPase YsxC from *Staphylococcus aureus* // *Biochemical and Biophysical Research Communications*. – 2024. – V. 699. – P. 149545.
25. **Krotkii I.I., [et al.], Lazarenko V.A.** Octahedral 3d-metal complexes of 4,6-di-tert-butyl-1,2-benzoquinone-2-monooxime: Synthesis, structure, and magnetic properties // *Polyhedron*. – 2024. – V. 251. – P. 116876.
26. **Filonenko V.P., [et al.], Borisova P.A.** The influence of boron and silicon on the phase transformations of fullerene C60 at high temperatures and pressure // *Materials Letters*. – 2024. – V. 362. – P. 136245.
27. **Nayfert S.A., [et al.], Dorovatovskii P.V.** Structure of four vat dyes and of violanthrene // *Dyes and Pigments*. – 2024. – V. 222. – P. 111839.
28. **Yurpalova D.V., [et al.], Khramov E.V.** Design of Efficient Supported Pd-Co Catalysts for Selective Hydrogenation of Acetylene // *Journal of Catalysis*. – 2024. – V. 432. – P. 115415.
29. **Lebedev V.T., [et al.], Peters G.S.** Proton-conducting membranes based on Nafion® synthesized by using nanodiamond platform // *Journal of Membrane Science Letters*. – 2024. – V. 4. – P. 100070.
30. **Chuprin A.S., [et al.], Dorovatovskii P.V.** Preparation, X-ray Characterization, and Reactivity of the Rodlike and Angular Germanium- and Titanium(IV)-Capped Iron(II) Bis-Clathrochelates and Their Mono- and Bis-Capped (Semi)clathrochelate Precursors // *Inorganic Chemistry*. – 2024. – V. 63. – P. 4299-4313.
31. **Ovsyannikov A., [et al.], Dorovatovskii P.V.** Influence of Neutral Auxiliary Ligands on Crystal Structure and Magnetic Behaviour of New [MnII2MnIII2] Clusters Supported by p-Adamantylcalix[4]arene // *New Journal of Chemistry*. – 2024. – V. 48. – P. 203-215.
32. **Rukk N.S., Lazarenko V.A., [et al.]** Specific features of Copper(II) chloride complexes with Caffeine: Synthesis, Structure, DFT calculations // *Inorganica Chimica Acta*. – 2024. – V. 566. – P. 122007.
33. **Pavlov D.I., [et al.], Dorovatovskii P.V., Lazarenko V.A.** Multiresponsive luminescent metal-organic framework for cooking oil adulteration detection and gallium(III) sensing // *Food Chemistry*. – 2024. – V. 445. – P. 138747.
34. **Chuvankova O.A., [et al.], Chumakov R.G., Lebedev A.M.** Electronic structure and composition of tin oxide thin epitaxial and magnetron layers according to synchrotron XANES studies // *Condensed Matter and Interphases*. – 2024. – V. 26. – P. 153-162.
35. **Goloveshkin A.S., Kulikova E.S.** Crystal Structure of Nilotinib Hydrochloride Monohydrate According to Powder X-Ray Diffraction Data // *Journal of Structural Chemistry*. – 2024. – V. 65. – P. 585-592.
36. **Zhuk N.A., [et al.], Lebedev A.M.** XPS and NEXAFS Characterization of Mg/Zn and Mn Codoped Bismuth Tantalate Pyrochlores // *Inorganics*. – 2024. – V. 12. – P. 74.
37. **Goray L.I., [et al.], Borisov M.M., Yakunin S.N.** Fine characterization of MBE-grown super-multi-period AlGaAs/GaAs superlattices designed for THz radiation sources // *Materials Science in Semiconductor Processing*. – 2024. – V. 169. – P. 107875.
38. **Petrakova N.V., [et al.], Trigub A.L., Rogachev A.V.** Synthesis and characterization of luminescent cerium-doped hydroxyapatite // *Ceramics International*. – 2024. – Online first.
39. **Tiwari A., [et al.], Yakunin S.N., [et al.]** X-ray standing wave characterization of the strong metal-support interaction in Co/TiOx model catalysts // *Journal of Applied Crystallography*. – 2024. – V. 57(2). – P. 481-492.
40. **Lev L.L., [et al.], Lebedev A.M., Nazin V.G., Chumakov R.G.** Anomalous Band Bending in the (K_{0.8}Na_{0.2})_{0.8}Fe_{1.8}Se₂ Superconductor // *Moscow University Physics Bulletin*. – 2024. – V. 79(1). – P. 46-53.
41. **Shcherbakov I.N., Krotkii I.I., [et al.], Lazarenko V.A.** Field induced slow magnetic relaxation in a linear homotrinary manganese heterospin coordination compound with S = 7/2 ground state and intriguing spin density distribution // *Optics*. – 2024. – V. 5. – P. 1-15.
42. **Kuz'micheva G.M., [et al.], Svetogorov R.D., Lazarenko V.A., Khramov E.V.** Toward an understanding of the role of structural organization and point defects in the formation of functional pure and Tm³⁺-doped (Ca_{3-x}Sr_x)(VO₄)₂ for diode-pumped and SRS lasers // *Solid State Ionics*. – 2024. – V. 411. – P. 116579.
43. **Gusev D.M., Dorovatovskii P.V., [et al.]** Reactions of substituted 1H-imidazole-2-thiols with pent-2-en-4-yn-1-ones // *Russian Chemical Bulletin*. – 2024. – V. 73. – P. 1005-1012.
44. **Omelchenko A.I., [et al.], Kaloyan A.A., Shepeleva V.O., Podurets K.M.** New Approaches in the Tomographic Visualization of Joints Using X-ray Contrast Nano-particles and Laser Radiation // *Crystallography Reports*. – 2024. – V. 69. – P. 214-221.
45. **Parunova Y., [et al.], Tikhomirov S., Kondratev O., Chumakov R.** A composite cathode of biofuel cell based on cross-linked Poly[3,4-ethylenedioxythiophene] polystyrene sulfonate and platinum nanoparticles // *Electroanalysis*. – 2024. – V. 36. – P. e202300380.
46. **Zueva A.Y., [et al.], Dorovatovskii P.V.** A family of hexacopper phenylsilsesquioxane/acetate complexes: synthesis, solvent-controlled cage structures, and catalytic activity // *Chemistry - A European Journal*. – 2024. – V. 30. – P. e202401164.
47. **Struchkov N.S., [et al.], Chumakov R.G.** Aminated reduced graphene oxide-carbon nanotube composite gas sensors for ammonia recognition // *Sensors and Actuators, B: Chemical*. – 2024. – V. 417. – P. 136088.
48. **Korkh Y.V., [et al.], Chumakov R.G.** A Study of Rare Earth Intermetallic Compound La_{0.73}Dy_{0.27}Mn₂Si₂ by Raman Spectroscopy, Magnetic Force Microscopy, and Resonance Photoemission Spectroscopy // *Physics of Metals and Metallography*. – 2024. – V. 125. – P. 470-478.

49. Gerber E., [et al.], Trigub A.L., [et al.], Svetogorov R., [et al.] Ammonium Polyuranates: Old Dog, New Structural Tricks // *Inorganic Chemistry*. – 2024. – V. 63. – P. 13402-13412.
50. Buikin P., [et al.], Kulikova E., [et al.] Crystal structure of rilpivirine hydrochloride, N6H19C22Cl // *Powder Diffraction*. – 2024. – P. 1-6.
51. Saraev A.A., [et al.], Trigub A.L., [et al.] Cu/TiO₂ Photocatalysts for CO₂ Reduction: Structure and Evolution of the Cocatalyst Active Form // *Transactions of Tianjin University*. – 2024. – V. 30. – P. 140-150.
52. Arsenyeva K.V., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Donor-acceptor complexes of main group 14 elements with α -diimines and catecholate ligands // *Russian Chemical Bulletin*. – 2024. – V. 73. – P. 117-125.
53. Demina P.A., [et al.], Timaeva O.I., Kulikova E.S., [et al.] Effect of Photocon-version Conditions on the Spectral and Cytotoxic Properties of Photoconvertible Fluorescent Polymer Markers // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2024. – V. 26. – P. 13078-13089.
54. Romanchuk A.Y., Trigub A.L., Kalmykov S.N. Going deeper into plutonium sorption affected by redox // *Journal of Contaminant Hydrology*. – 2024. V. 266. P. 104400.
55. Dyachenko I.V., Dyachenko V.D., Dorovatovskii P.V., [et al.] Multicomponent Synthesis of Nicotinamide and Thieno[2,3-b]pyridine Derivatives // *Russian Journal of Organic Chemistry*. – 2024. – V. 60. – P. 588-595.
56. Kantur I., [et al.], Chumakov R.G., [et al.] Spin State of Manganese Ions in Double Manganite Nd_{0.9}Sm_{0.1}BaMn₂O₆ by X-Ray Photoemission and X-Ray Emission Spectroscopy // *SSRN*. – 2024. – V. 125. – P. 4861634.
57. Chuprin A.S., Vogzhanina A.V., Dorovatovskii P.V., [et al.] Stabilization of a given type of 3d-metal-centered cage complexes via encapsulation and/or hydrogen abstraction // *Inorganic Chemistry Communications*. – 2024. – V. 164. – P. 112395.
58. Trofimova O.Y., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Structural diversity of cadmium coordination polymers based on an extended anilate-type ligand // *CrystEngComm*. – 2024. – V. 26. – P. 3077-3085.
59. Ovsyannikov A.S., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Synthesis and Porous Crystal Structure of a New Tetranuclear {Mn₂^{II}Mn₂^{III}} Cluster Based on a Ca-lix[4]Arene Functionalized at the Upper Rim by Distal p-(4-Nitrophenyl)Diazenyl and p-tert-Butyl Groups // *Journal of Structural Chemistry*. – 2024. – V. 65. – P. 313-322.
60. Demakov P.A., [et al.], Dorovatovskii P.V., Lazarenko V.A., [et al.] Synthesis, Structure and Magnetic Properties of Low-Dimensional Copper(II) trans-1,4-cyclohexanedicarboxylate // *Crystals*. – 2024. – V. 14. – P. 555.
61. Dudko E.M., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Thermal decomposition of DMSO or DMF solvates: an advanced method for obtaining new hybrid bismuth(III) halides // *CrystEngComm*. – 2024. – V. 26. – P. 3490-3498.
62. Chaltsev B.V., [et al.], Lazarenko V.A. Synthesis, structure, and biological activities of mixedligand nickel(II) and cobalt(II) complexes of benzoylhydrazone 2-(N-tosylamino)benzaldehyde and benzimidazole derivatives // *Inorganica Chimica Acta*. 2024. V. 572. P. 122272.
63. Zayakin I.A., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Toward New Horizons in Verdazyl-Nitroxide High-Spin Systems: Thermally Robust Tetraradical with Quintet Ground State // *Journal of the American Chemical Society*. – 2024. – V. 146. – P. 13666-13676.
64. Mitchenko S., [et al.], Svetogorov R., [et al.] Tuning selectivity in low-temperature Fischer-Tropsch synthesis by applying gas recycle mode // *Applied Catalysis A: General*. – 2024. – V. 675. – P. 119641.
65. Sinelshchikova A.A., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Unexpected Supramolecular-Induced Redox Switching in Sandwich Gd Bisphthalocyaninate // *Inorganic Chemistry*. – 2024. – V. 63. – P. 8163-8173.
66. Manyakin M.D., [et al.], Chumakov R.G., Lebedev A.M. First-Principles Calculation and X-ray Photoelectron Spectroscopy of Rutile-Like Transition Metal Oxides TiO₂ and MoO₂ // *Nanotechnologies in Russia*. – 2024. – V. 19. – P. 237-245.
67. Yurasova I.I., [et al.], Veligzhanin A.A., Peters G.S. Subglobular Structure of Photonic Crystal Nanospheres Grown Based on Amorphous Silica at Different Water/TEOS Molar Ratios in the Initial Mixtures // *Nanotechnologies in Russia*. – 2024. – V. 19. – P. 188-197.
68. Zhuk N.A., [et al.], Lebedev A.M. Cu(I) and Cu(II) in mixed bismuth tantalate pyrochlores according to XPS and NEXAFS spectroscopy // *Materials Letters*. – 2024. – V. 377. – P. 137545.
69. Matveevskii K., Nikolaev K., [et al.], Rogachev A., Yakunin S. Laboratory-based 3D X-ray standing-wave analysis of nanometre-scale gratings // *Journal of Applied Crystallography*. – 2024. – V. 57. – P. 1288-1296.
70. Safonov A.I., Nikolaev K.V., Yakunin S.N. Hyperspectral X-Ray Imaging For Nanometrology // *Crystallography Reports*. – 2024. – V. 69. – № 4. – P. 609-615.
71. Malyshev I.V., Chkhalo N.I., Yakunin S.N. Project of X-Ray Optical Scheme of a Lithograph with a Transmissive Dynamic Mask and a Synchrotron Radiation Source // *Technical Physics*. – 2024. – V. 69. – № 7. – P. 2037-2045.
72. Vetchinnikov M.P., [et al.], Khramov E.V., Veligzhanin A.A., [et al.] Local atomic structure and optical properties of zinc-phosphate glasses single-doped with Ag, Au, Rb, Nd and Er // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2024. – V. 646. – P. 123250.
73. Eid M.E.A., [et al.], Khramov E.V., [et al.] In Situ XAS Diagnostics of Reductive Hydroformylation Reaction in Segmented Flow Under Elevated Pressure and Temperature // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. – 2024. – V. 63. – 35. – P. 15397-15406.
74. Kuz'micheva G.M., [et al.], Svetogorov R.D., Lazarenko V.A., Khramov E.V. Toward an understanding of the role of structural organization and point defects in the formation of functional pure and Tm³⁺-doped [Ca_{3-x}Sr_x](VO₄)₂ for diode-pumped and SRS lasers // *Solid State Ionics*. – 2024. – V. 411. – P. 116579.
75. Yakovenko R.E., [et al.], Svetogorov R.D., The Influence of Platinum on the Catalytic Properties of Bifunctional Cobalt Catalysts for the Synthesis of Hydro-carbons from CO and H₂ // *Catalysts*. – 2024. – V. 14. – № 6. – P. 351.
76. Kasimova V.M., [et al.], Targonsky A.V., Rogachev A.V. Effect of Isothermal High-Temperature Annealing on the Optical Properties of Gd₃Al_xGa_{5-x}O₁₂ (x = 1-3) and Gd₃Al₂Ga₃O₁₂:Ce³⁺ Crystals // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. – 2024. – V. 88. – № 5. – P. 728-735.
77. Zhuk N.A., [et al.], Lebedev A.M. Synthesis and NEXAFS and XPS Characterization of Pyrochlore-Type Bi_{1.865}Co_{0.2}Fe_{0.2}Ta₂O₉+ Δ // *Chemistry*. – 2024. – V. 6. – № 5. – P. 1078-1090.
78. Gutorova S.V., [et al.], Trigub A.L. Disclosing the mechanism of uranium(VI) solvent extraction by polydentate ligands in a polar solvent: The role of ion pairs // *Journal of Molecular Liquids*. – 2024. – V.415. – P. 126382.
79. Plakhova T.V., [et al.], Svetogorov R.D., Trigub A.L., [et al.] Unexpected nanoscale CeO₂ structural transformations induced by ecologically relevant phosphate species // *Chemosphere*. – 2024. – V. 368. – P. 143664.
80. Kuz'micheva G., Trigub A., Rogachev A., [et al.] Physicochemical Characterization and Antimicrobial Properties of Lanthanide Nitrates in Dilute Aqueous Solutions // *Molecules*. – 2024. – V. 29. – № 17. – P. 4023.
81. Averyanov D.V., [et al.], Kondratev O.A., [et al.] Direct epitaxial integration of the ferromagnetic oxide EuO with GaAs // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2024. – V. 1009. – P. 176961.

82. Gokhfeld Y.S., [et al.], Kondratev O.A., Belyaeva A.O., [et al.] Cationic Disorder in Co_2AlBO_5 : Effects on Magnetic and Electrical Properties // *Crystal Growth and Design*. – 2024. – V. 24. – № 17. – P. 6972-6981.
83. Mattiat H., [et al.], Kondratev O.A., [et al.] Mapping the phase-separated state in a 2D magnet // *Nanoscale*. – 2024. – V. 16. – № 10. – P. 5302-5310.
84. Averyanov D.V., [et al.], Kondratev O.A., [et al.] Engineering of a Layered Ferromagnet via Graphitization: An Overlooked Polymorph of GdAlSi // *Journal of the American Chemical Society*. – 2024. – V. 146. – № 23. – P. 15761-15769.
85. Ezubchenko I.S., [et al.], Kondratev O.A., [et al.] Resistive Switching in Nitride Memristors: Experiment // *Nanobiotechnology Reports*. – 2024. – V. 19. – № 1. – P. 172-179.
86. Averyanov D.V., [et al.], Kondratev O.A., [et al.] Emerging 2D Ferromagnetism in Graphenized GdAlSi // *Small*. – 2024. – Online first.
87. Plakhova T.V., [et al.], Svetogorov R.D., [et al.] Overlooked impact of surface hydroxylation on the solubility of less-soluble compounds: a case study of CeO_2 // *Environmental Science: Nano*. – 2024. – V. 11. – № 8. – P. 3551-3562.
88. Chen J., [et al.], Svetogorov R., [et al.] Hard magnetic colloidal nanoplates with tunable size for magneto-optical applications // *Journal of Materials Chemistry C*. – 2024. – V. 12. – № 37. – P. 14865-14874.
89. Kuzenkova A.S., Plakhova T.V., Svetogorov R.D., Kulikova E.S., Trigub A.L., [et al.] Neglected solid phase pentavalent plutonium carbonate in the environment // *Environmental Science: Nano*. – 2024. – V. 11. – № 10. – P. 4381-4393.
90. Il'ina K.B., Konarev P.V., Sukhanov A.E., [et al.], Peters G.S., [et al.] A Novel Sealed Cell with Microliter Cavities for Temperature Measurements of Solution Structure by Small-Angle X-Ray Scattering // *Instruments and Experimental Techniques*. – 2024. – V. 67. – № 3. – P. 528-535.
91. Dyachenko I.V., Dyachenko V.D., Dorovatovskii P.V., [et al.] Three-component synthesis of 2-amino-3-cyano-4H-pyrans and a new version of the pyran ring opening // *Russian Chemical Bulletin*. – 2024. – V. 73. – № 6. – P. 1671-1678.
92. Dyachenko I.V., Dyachenko V.D., Dorovatovskii P.V., [et al.] Three-Component Synthesis of Tetrahydroisoquinolines via SNVin Reaction // *Russian Journal of Organic Chemistry*. – 2024. – V. 60. – P. 1619-1626.
93. Khamidullina L.A., Puzyrev I.S., Dorovatovskii P.V., [et al.] The First Example of Dicycane Nickel(II) Complex in the Series of Unsymmetrically Substituted Diketones // *Russian Journal of Coordination Chemistry*. – 2024. – V. 50. – № 7. – P. 48-56.
94. Zueva A.Y., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Rational (supra)molecular design and catalytic activity of cage-like Cu_4 -based phenylsilsesquioxanes // *Nanoscale*. – 2024. – V. 16. – № 39. – P. 18389-18401.
95. Agarkov A.S., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Structure-forming non-covalent bonding of new 2-[4-carboxyphenylhydrazinylidene][1,3]thiazolo[3,2-a]pyrimidines in the crystalline phase // *Russian Chemical Bulletin*. – 2024. – V. 73. – № 8. – P. 2350-2358.
96. Limarev I.P., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] In a search of the single-atom electrocatalysts for hydrogen production: The first sulfur-free mono- and diphenyl-threnyl-terminated iron and cobalt(II) clathrochelates versus their thioanalogs // *Process Safety and Environmental Protection*. – 2024. – V. 192. – P. 285-295.
97. Rabchinskii M.K., [et al.], Chumakov R.G., [et al.] Chemistry of Reduced Graphene Oxide: Implications for the Electrophysical Properties of Segregated Graphene-Polymer Composites // *Nanomaterials*. – 2024. – V. 14. – № 20. – P. 1664.
98. Filnov S.O., [et al.], Chumakov R.G., Lebedev A.M., [et al.] Room Temperature Ferromagnetism in Graphene/ $\text{SiC}(0001)$ System Intercalated by Fe and Co // *Physica Status Solidi - Rapid Research Letters*. – 2024. – V. 18. – № 3. – P. 2300336.
99. Ibragimov E.S., Pilyak F.S., Kulikov A.G., Marchenkov N.V., Pisarevsky Y.V., Kaloyan A.A., [et al.] Investigation of the Spatial Distribution of Deformations in Quartz Piezo Elements by the X-Ray Topography Method // *Acoustical Physics*. – 2024. – V. 70. – № 3. – P. 465-471.
100. Rubtsova I.K., [et al.], Dorovatovskii P.V. Effect of crystallization conditions on the composition and structure of $\{\text{ZnCa}\}$ metalorganic coordination polymers with isophthalate anions // *Russian Chemical Bulletin*. – 2024. – V. 73. – № 10. – P. 2852-2860.
101. Trofimova O.Yu., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] 3,6-Dipyridyl-1,2,4,5-tetrazine in the Synthesis of Zinc and Cadmium Metal-Organic Frameworks with Anilate-Type Ligands // *Russian Journal of Coordination Chemistry*. – 2024. – V. 50. – № 9. – P. 636-645.
102. Panina M.V., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Highly efficient synthesis of mononuclear Pt-based carboxylic complexes $\text{trans}[\text{Pt}(\text{OC}(\text{O})\text{R})_2]$ (R = Me, tBu, Ph) // *Mendeleev Communications*. – 2024. – V. 34. – № 6. – P. 808-810.
103. Agarkov A.S., [et al.], Dorovatovskii P.V., [et al.] Structure-forming non-covalent bonding of new 2-[4-carboxyphenylhydrazinylidene][1,3]thiazolo[3,2-a]pyrimidines in the crystalline phase // *Russian Chemical Bulletin*. – 2024. – V. 73. – № 8. – P. 2350-2358.
104. Shilina M.I., [et al.], Khramov E.V., [et al.] Electronic State of Rhodium in Catalysts for the Oxidative Carbonylation of Methane into Acetic Acid Based on Rh/HZSM-5: Effects of Adding Copper and Zinc // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. – 2024. – V. 98. – № 13. – P. 3192-3200.
105. Prutskov G.V., Subbotin I.A., [et al.], Pashaev E.M. Peculiarities of the Formation of Dy/Co Periodic Multilayer Systems upon Magnetron Sputtering // *Physics of Metals and Metallography*. – 2024. – V. 125. – № 10. – P. 1066-1074.
106. Makarova I.P., Isakova N.N., Kalyukanov A.I., [et al.] Features of the crystal structure and surface of superprotonic conductor caesium hydrogen sulfatephosphate // *Acta Crystallographica Section B*. – 2024. – V. 80. – P. 201-210.
107. Murashev M.M., Em V.T., Glazkov V.P., [et al.] Study of additive manufacturing products using neutron imaging // *Russian Journal of Nondestructive Testing*. – 2024. – V. 60. – № 1. – P. 35-43.
108. Vasiliev A.L., Subbotin I.A., Belyaeva A.O., [et al.], Pashaev E.M. Microstructure Features of Yttrium Orthoferrite Thin Films on Sapphire // *Physics of Metals and Metallography*. – 2024. – V. 125. – № 1. – P. 64-72.

Биомедицинские исследования

109. Samygina V.R., Vlaskina A.V., [et al.], Malakhova Y.N., Nikolaev K.V., Rogachev A.V., Malysheva N.E., Novikova N.N., Kovalchuk M.V. Study of the Interaction of the S-Protein of SARS-CoV-2 with Isolated Lipid Model Membranes // *Crystallography Reports*. – 2024. – V. 69. – № 6. – P. 931-939.
110. Chaltsev B.V., [et al.], Lazarenko V.A. Structure and Biological Activity of Binu-clear Mixed-Ligand Complexes of Nickel(II) Benzoylhydrazone 2-(N-Tosylamino)Benzaldehyde // *Journal of Structural Chemistry*. – 2024. – V. 65. – № 8. – P. 1982-1991.
111. Chaltsev B.V., [et al.], Lazarenko V.A. Copper(II) 2-(N-Tosylamino)benzaldehyde Benzoylhydrazone Complexes: Synthesis, Structures, Properties, and Biological Activity // *Russian Journal of Coordination Chemistry*. – 2024. – V. 50. – P. 543-552.
112. Fedotov I., [et al.], Svetogorov R.D., [et al.] Brazing of ZTA ceramic with titanium for biomedical application // *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. – 2024. – V. 134. – P. 4477-4486.

Культурное наследие

113. Kovalenko E.S., Tereschenko E.Yu., Yatsishina E.B., Trifonov V.A., Shishlina N.I., Loboda A.Yu., Khvostikov V.A. Tricky Technology of Making Silver Seed Beads in the Early Bronze Age, N-W Caucasus // *Archaeometry*. – 2024. – V. 66. – P. 493-717.
114. Гурьева П.В., Коваленко Е.С., Мурашев М.М., Терещенко Е.Ю., Яцишина Е.Б., Бейлин Д.В., Рукавишникова И.В., Федосеев Н.Ф., Смекалова Т.Н., Антипенко А.В., Лобода А.Ю. Металлические находки из каменного склепа на северном участке некрополя Пантикапея (район «Глинище»): комплексный анализ // *Российская археология*. – 2024. – № 1. – С. 75-92.
115. Гурьева П.В., Коваленко Е.С., Терещенко Е.Ю., Яцишина Е.Б., Журавлев Д.В. Два кидских фигурных сосуда II в. н.э. из собрания Государственного исторического музея: технологические исследования // *Российская археология*. – 2024. – № 2. – С. 36-50.
116. Гурьева П.В., Коваленко Е.С., Терещенко Е.Ю., Яцишина Е.Б., Журавлев Д.В. Кипрские фигурные сосуды эпохи бронзы из собрания Государственного исторического музея: взгляд внутрь // *Вестник древней истории*. – 2024. – Т. 84. – № 2. – С. 275-299.
117. Коваленко Е.С., Гурьева П.В., Кондратьев О.А., Кожухова Е.И., Мандрыкина А.В., Терещенко Е.Ю., Яцишина Е.Б., Шишлина Н.И., Орфинская О.В., Леонова Н.В., Лобода А.Ю. Новые подходы к анализу средневекового текстиля методами исторического материаловедения // *Краткие сообщения Института археологии*. – 2024. – В. 276. – С. 312-327.
118. Гурьева П.В., Коваленко Е.С., Подурец К.М., Терещенко Е.Ю., Яцишина Е.Б., Шалявина Н.Б., Зайцева И.Е. Технология изготовления древнерусских серебряных зеренных украшений по результатам вилизации внутреннего строения бусин из Северо-Восточной Руси // *Краткие сообщения Института археологии*. – 2024. – В. 276. – С. 363-378.
119. Коваленко Е.С., Гурьева П.В., Подурец К.М., Терещенко Е.Ю., Яцишина Е.Б., Скопцова И.Н., Малахов С.Н., Пожидаев В.М. Сложная жизнь бургундского шкафа конца XV–начала XVII вв. // *Российские нанотехнологии*. – 2024. – Т. 19. – № 5. – С. 644-652.
120. Терещенко Е.Ю., Гурьева П.В., Коваленко Е.С., Кондратьев О.А., Куликова Е.С., Мандрыкина А.В., Яцишина Е.Б., Журавлев Д.В., Ильина Т.А., Кузьмина Е.А., Шалявина Н.Б. Аттические полихромные фигурные сосуды из собрания ГИМ: комплексные исследования // *Кристаллография*. – 2024. – Т. 69. – №6. – С. 1062-1077.
121. Kovalenko E.S., Gurieva P.V., Podurets K.M., Tereschenko E.Yu., Yatsishina E.B., Novichikhin A.M., Smekalova T.N., Loboda A.Yu. X-ray Tomography of a Meaotian-Sarmatian Mirror from Eastern Trans-Kuban with a Thematic Image // *Nanobiotechnology Reports*. – 2024. – V. 19. – № 4. – P. 549-553.
122. Коваленко Е.С., Мурашев М.М., Подурец К.М., Гурьева П.В., Терещенко Е.Ю., Яцишина Е.Б., Столярова Е.К., Зайцева И.Е., Мухина Т.Ф. Имитации перегородчатых эмалей в древнерусском искусстве (на примере археологических находок из Владимиро-Суздальской земли) // *Актуальные проблемы теории и истории искусства*. – 2024. – В. 14. – С. 766-777.



Глава 6 Экспериментальные установки ККСНИ

Глава 6

Экспериментальные установки ККСНИ	159
План экспериментального зала синхротрона	161
Перечень экспериментальных станций синхротрона «КИСИ-Курчатов»	162
План экспериментального зала ИР-8.....	164
Лабораторные рентгеновские установки	166

Экспериментальные установки ККСНИ

План экспериментального зала синхротрона

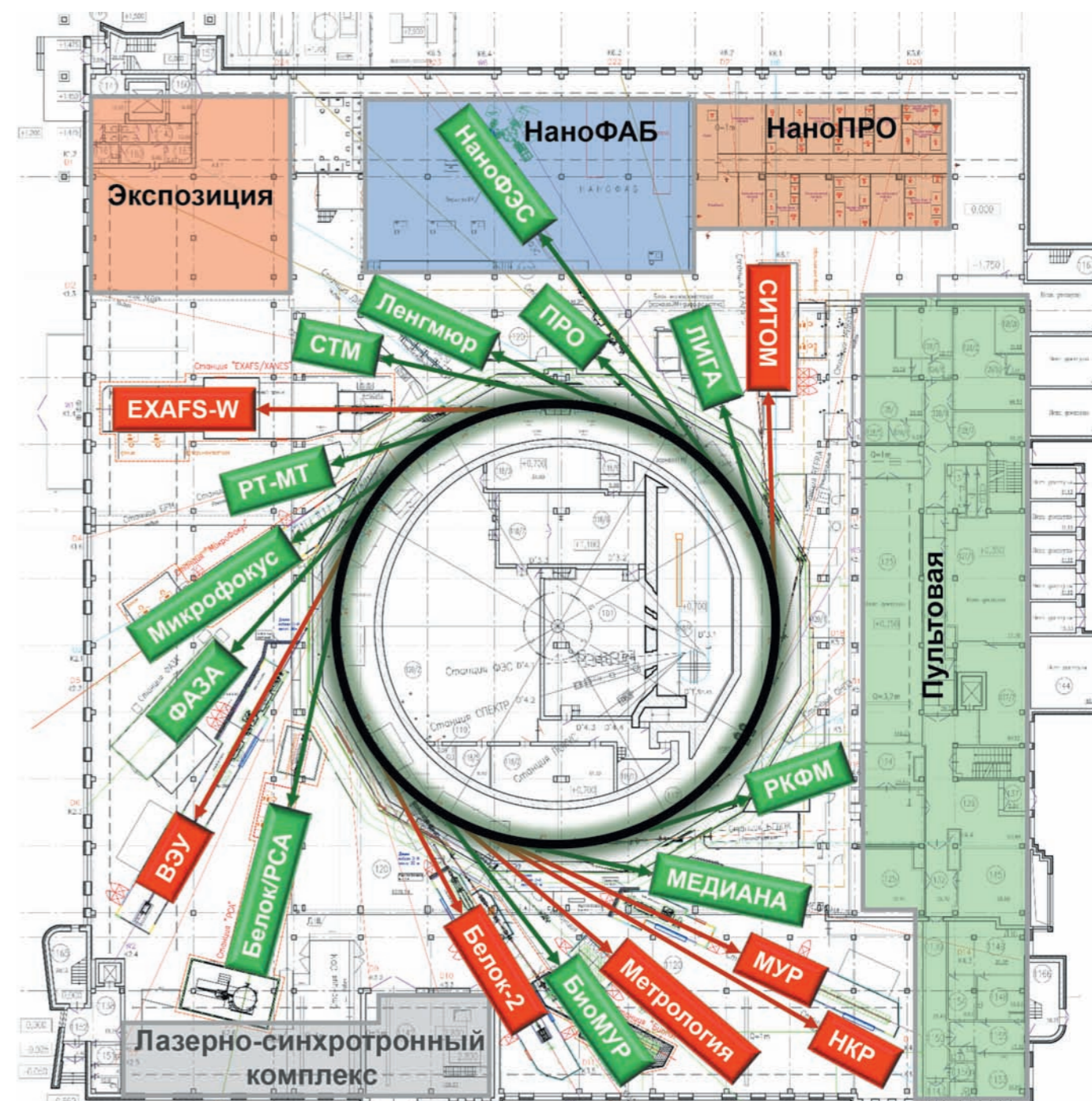


Рисунок 6.1. – План экспериментального зала синхротронного источника. Размещение экспериментальных станций (зеленым- станции, введенные в эксплуатацию, красным- строящиеся)

Перечень экспериментальных станций синхротрона «КИСИ-Курчатов»

Таблица 6.1. – Рассеяние и дифракция

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
1.2. ЛЕНГМЮР	Рентгеновская рефлектометрия (XR); Стоячие рентгеновские волны (XSW); Дифракция в скользящей геометрии (GID); Рентгеновская спектроскопия поглощения во флуоресцентной моде (XAS); Рентгеновская флуоресценция в полном внешнем отражении (TXRF)/ Жидкостной гониометр с рабочим угловым диапазоном 0.3 Å ⁻¹ ; Ленгмюровская ванна для формирования образцов	5–18 кэВ, ΔE/E ~ 4 · 10 ⁻⁴ Q _{xy} [0.15;0.15] Å ⁻¹
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, ΔE/E ~ 10 ⁻⁴ ÷ 4 · 10 ⁻³
2.6. БЕЛОК/РСА	Рентгеноструктурный анализ (РСА) монокристаллических объектов; РСА макромолекулярных кристаллов с большими параметрами ячейки; Прецизионная порошковая дифракция с двумерным сканирующим детектором	5–40 кэВ, ΔE/E ~ 2 · 10 ⁻³ Размер кристаллов: 5–400 мкм Разрешение: до 0.65 Å
3.5. БиМУР	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) ΔE/E ~ 1 · 10 ⁻³
4.2. МУР	Малоугловое рассеяние. Диапазон температур образца - 195°C, ÷600°C	5–20 кэВ, ΔE/E ~ 8 · 10 ⁻⁴ Размер пучка 1.4 x 0.3 мм
4.6. РКФМ	Двух-трёхкристальная дифрактометрия; Многоволновая дифракция; Картирование обратного пространства; Рефлектометрия; Стоячие рентгеновские волны; Рентгенофлуоресцентный анализ; Рентгеноакустика	Моно Si(111) и Si(311) 5–40 кэВ, ΔE/E ~ 1 · 10 ⁻³ Размер пучка max: 4.0 x 60 мм; min: 10 x 10 мкм

Таблица 6.2. – Спектроскопия

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
1.36 СТМ	EXAFS/XANES-спектроскопия, порошковая дифракция	5–30 кэВ, ΔE/E ~ 2 · 10 ⁻⁴
1.4. EXAFS-W	Спектроскопия EXAFS, в т.ч. на высоких энергиях	4–60 кэВ, ΔE/E ~ 2 · 10 ⁻⁴
2.2. МикроФокус	Рентгенофлуоресцентная спектроскопия, порошковая дифракция	5–30 кэВ, ΔE/E ~ 2 · 10 ⁻⁴
6.5. НаноФЭС	Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES); Околокраевое рентгеновское поглощение (NEXAFS); SPM(STM+AFM) микроскопия	25–1500 эВ, ΔE/E ~ 4 · 10 ⁻⁴

Таблица 6.3. – Визуализация

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	СТАНЦИЯ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
1.6. РТ-МТ	Микротомография, интроскопия и топография	5–30 кэВ, ΔE/E ~ 2 · 10 ⁻⁴ Ø15 мм, 15x15x15 мкм, Ø 1,5 мм, 2.5x2.5x2.5 мкм
4.3. МЕДИАНА	Микротомография, фазовый контраст, топография	10–80 кэВ, ΔE/E ~ 2 · 10 ⁻⁴ , 35 x 5 мм, 9x9x9 мкм
6.3. ЛИГА	Томография на белом пучке	50–80 кэВ, ΔE/E ~ 30% 85 x 3 мм, 25x25x25 мкм

План экспериментального зала ИР-8

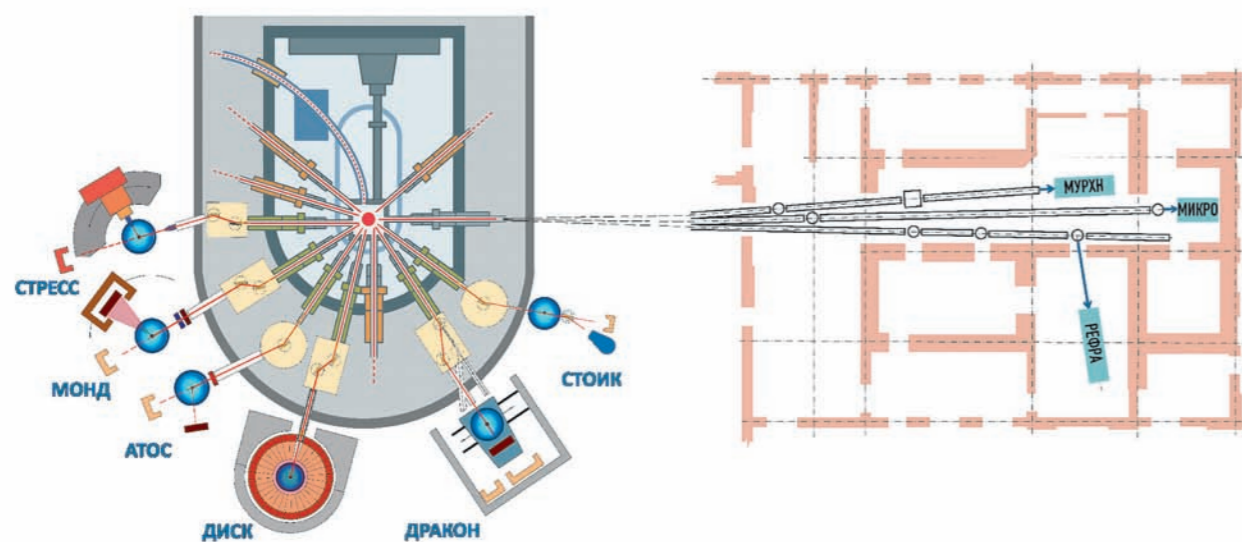


Рисунок 6.2. – Схема расположения станций УНУ НИК ИР-8 на поперечном разрезе ректора

Таблица 6.4. – 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 дифракция	Порошковый дифрактометр с кольцевым детектором. Окружение образца: криостат, печь, камеры высокого давления	1 – 2,5 Å $\Delta d/d = 2\%$

Таблица 6.5. – Рассеяние

КАНАЛ, СТАНЦИЯ	МЕТОДИКИ	ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ	ДИАПАЗОН РАЗРЕШЕНИЕ
ГЭК 5 АТОС	Неупругое когерентное рассеяние на монокристалльных 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 6.6. – Визуализация

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

Таблица 6.7. – 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



Рисунок 6.3. – Дифрактометр рентгеновский BRUKER D8 DISCOVER



Рисунок 6.4. – Рентгеновский дифрактометр высокого разрешения SmartLab



Рисунок 6.5. – Рентгеновский спектрометр BRUKER M4 TORNADO PLUS



Рисунок 6.6. – Многофункциональный рентгеновский дифрактометр SmartLab

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, углеводородов, 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 биомолекул, 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 ($0.3...0.6^\circ$) 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).

Составители:

Р.Д. Светогоров, В.А. Лазаренко, А.А. Гогин, Е.А. Никанорова, А.А. Велигжанин, К.М. Подурец,
П.А. Борисова, И.А. Субботин, С.Н. Якунин, Н.В. Марченков

Оформители:

Н.А. Демьянова, О.С. Попович, Н.М. Чубова, О.Л. Большакова, М.А. Мишин

Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований
Годовой отчет 2024