



КУРЧАТОВСКИЙ  
ИНСТИТУТ  
ДЛЯ СТРАНЫ  
И МИРА

МЕЖДУНАРОДНЫЙ ФОРУМ  
**ПРИРОДОПОДОБНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**



**КУРЧАТОВСКИЙ ФОРУМ**  
СИНХРОТРОННЫХ И НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

# ТЕЗИСЫ

24–27 октября 2023 года  
Москва

# СОДЕРЖАНИЕ

<b>СЕССИЯ 1. Актуальные исследования и разработки, выполняемые на источниках синхротронного излучения и нейтронов, а также комплексах ядерной медицины.....</b>	<b>17</b>
---	-----------

<b>СЕКЦИЯ 1.1. Синхротронные и нейтронные исследования (разработки) в области материаловедения для развития наукоемких производственных технологий [конструкционные материалы] .....</b>	<b>17</b>
--	-----------

Применение синхротронного излучения для исследования локальной атомной структуры неравновесных фазовых состояний, полученных методами экстремальных воздействий <i>Р.В. Сундеев, А.В. Шалимова, А.А. Велигжанин, А.М. Глезер .....</i>	<i>18</i>
---	-----------

Напыление аморфных пленок оксида ванадия электронным лучом в кислородной атмосфере <i>Е.В. Таркаева, В.А. Иевлева, А.И. Дулебо, А.В. Муратов, А.Ю. Кунцевич.....</i>	<i>19</i>
---	-----------

Структура гидридных фаз на основе интерметаллидов и высокоэнтропийных сплавов <i>С.А. Лушников, Т.В. Филиппова, С.С. Агафонов .....</i>	<i>20</i>
--	-----------

<b>СЕКЦИЯ 1.1. Синхротронные и нейтронные исследования (разработки) в области материаловедения для развития наукоемких производственных технологий [материалы и изделия для ядерной и термоядерной энергетики, термоэлектрических и сверхпроводящих материалов].....</b>	<b>21</b>
--	-----------

Разработка фотомемристивных устройств на основе модифицированного оксида графена и перспективы синхротронных исследований их фотонаведенных электронных состояний и структурных переходов <i>Н.Д. Митюшев, Г.Н. Панин, А.Н. Баранов.....</i>	<i>22</i>
---	-----------

Синхротронные методы в <i>operando</i> режиме для изучения структурных и зарядовых трансформаций в материалах для металл-ионных аккумуляторов <i>О.А. Дрожжин .....</i>	<i>23</i>
--	-----------

Перспективы синхротронных исследований наноструктурированных и биоматериалов на станции НаноФЭС КИСИ-Курчатов <i>В.Н. Сивков, К.А. Бакина, С.В. Некипелов, О.В. Петрова, Д.В. Сивков, В.О. Рудковский, Р.Н. Скандаков.....</i>	<i>24</i>
---	-----------

Окислительно-восстановительные реакции плутония и его аналогов при сорбции на минералах <i>А.Ю. Романчук, А.Л. Тригуб, С.Н. Калмыков .....</i>	<i>25</i>
---	-----------

Фотокатализаторы восстановления CO <sub>2</sub> на основе TiO <sub>2</sub> : XAS исследование <i>А.А. Сараев, А.Ю. Куренкова, Е.Ю. Герасимов, А.Л. Тригуб, Е.А. Козлова .....</i>	<i>26</i>
--	-----------

**СЕКЦИЯ 1.1. Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области материаловедения для развития наукоемких  
производственных технологий [материалы и наноразмерные  
структуры для перспективных технологий и технических систем] ..... 27**

Расширение методов спектроскопии и микроскопии функциональных  
материалов в ультрамягкой рентгеновской области  
синхротронного излучения  
*С.Ю. Турищев, Е.В. Парина, О.А. Чувенкова..... 28*

Синхротронная мессбауэровская рефлектометрия  
в исследовании ультратонких пленок  $YFeO_3$   
*В.В. Изюров, А.П. Носов, И.В. Грибов, М.А. Андреева ..... 29*

Структурная характеристика феррожидкостей  
с применением малоуглового рассеяния СИ и нейтронов  
*М.В. Авдеев, А.В. Шуленина..... 30*

Равновесные нанослои в твёрдых растворах слоистых  
дихалькогенидов переходных металлов  
*А.Н. Титов ..... 31*

Рациональный дизайн кристаллических материалов на основе  
координационных соединений (тиа)каликс[4]аренов  
*А.С. Овсянников, Ю.В. Стрельникова, И.Д. Шутилов, П.В. Дороватовский,  
В.А. Лазаренко, С.Е. Соловьева, И.С. Антипин ..... 32*

Использование синхротронного излучения для исследования примесных  
атомов в матрицах со структурой граната общего состава  $(Gd,Y)_3Al_2Ga_3O_{12}$   
*П.В. Картюк, В.В. Дубов, В.Г. Смыслова, Д.Е. Лелекова, И.Ю. Комендо,  
А.А. Велигжанин, Е.В. Храмов ..... 33*

Лёгкие сцинтилляционные материалы для детектирования  
нейтронов и заряженных частиц  
*И.Ю. Комендо, М.В. Коржик, Д.Е. Лелекова, А.А. Фёдоров ..... 34*

Слоистые углеродсодержащие материалы – влияние термической пост  
обработки на функциональные свойства  
*О.В. Бойцова, А.А. Садовников..... 35*

К вопросу о кристаллической и надмолекулярной структуре  
бактериальной целлюлозы, синтезированной в тяжёлой воде  
*Г.П. Копица, Р.Ю. Смыслов, А.А. Кульминская, Е.В. Журишкина, Н.В. Цвигун,  
А.Е. Соколов, Ю.Е. Горшкова, А.К. Хрипунов, А.Е. Баранчиков ..... 36*

**СЕКЦИЯ 1.1. Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области материаловедения для развития наукоемких производственных  
технологий [метрологический контроль и сертификация] ..... 37**

<i>In situ</i> диагностика наноразмерных материалов на станции структурного материаловедения Курчатовского синхротрона М.А. Солдатов, И.Е. Горбань, В.А. Ролдугин, М.А. Грицай, П.В. Медведев .....	38
Новые алгоритмы обработки данных нейтронной томографии на основе сверточных нейронных сетей Б.А. Бакиров, С.Е. Кичанов.....	39
Корректировка ошибок в нано-метрологических исследованиях на примере метода стоячих рентгеновских волн К.В. Николаев, А.И. Сафонов, О.А. Кондратьев, Г.В. Пруцков, И.А. Субботин, С.Н. Якунин.....	40
Синхротронная времяразрешающая методика регистрации лазерно-индуцированных деформаций, и ее реализация для наблюдения пьезофотовольтаического эффекта в ниобате лития Е.И. Мареев, А.Г. Куликов, Ф.С. Пиляк, А.Е. Благов, Н.В. Марченков, Ю.В. Писаревский, Ф.В. Потёмкин, М.В. Ковальчук.....	41
<b>СЕКЦИЯ 1.2. Синхротронные и нейтронные исследования (разработки) в области живых систем, органических и гибридных материалов .....</b>	<b>42</b>
Совместное использование методов молекулярной динамики, МУРН и МУРР А.И. Титов, Д.В. Лебедев, А.В. Швецов .....	43
Структурные исследования бета-галактозидазы <i>Desulfurococcus amyloleticus</i> В.Р. Самыгина, Е.Б. Пичкур, Ю.В. Киль, В.Р. Сергеев, Г.Н. Рычков .....	44
Инновационные биокompозиты для регенеративной медицины Ю.Е. Горшков .....	45
Структурный анализ вирионов ряда растительных вирусов по данным малоуглового рентгеновского рассеяния М.В. Петухов, А.Л. Ксенофонтов, Э.В. Штыкова .....	46
Анализ данных рентгеноструктурного анализа комплексов эукариотической рибосомы с низкомолекулярными ингибиторами, индуцирующими прочтение стоп-кодонов К.С. Усачев, Ю.О. Згадзай, О.А. Колосова, М.М. Юсупов .....	47
Технологии искусственного интеллекта для анализа дифракционных паттернов биополимеров и их комплексов К.В. Шайтан .....	48
Структура геном-защитных биокристаллов по данным малоуглового рентгеновского рассеяния и крио-электронной микроскопии Л.А. Дадинова, Р.А. Камышинский, Ю.М. Чесноков, А.А. Можяев, А.М. Гордиенко, М.В. Петухов, Э.В. Штыкова .....	49

**СЕКЦИЯ 1.3. Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области социгуманитарных наук..... 50**

Исследование и реконструкция полихромной росписи лекифа IV в. до н.э.  
*Н.Б. Шалявина, Д.В. Журавлев, П.В. Гурьева, Е.С. Коваленко, Е.А. Кузьмина, А.Ю. Лобода,  
О.А. Кондратьев, Е.С. Куликова, А.В. Мандрыкина, Е.Ю. Терещенко, Е.Б. Яцишина..... 51*

Исследование ископаемых морских млекопитающих с помощью синхротронной и  
нейтронной томографии: результаты и перспективы  
*К.К. Тарасенко, Е.С. Коваленко, М.М. Мурашев, А.А. Калоян, К.М. Подурец ..... 52*

Исследование палеонтологических объектов с помощью  
синхротронной и нейтронной томографии  
*А.В. Пахневич, Е.С. Коваленко, А.А. Калоян, К.М. Подурец..... 53*

Комплексные исследования каменных артефактов Дальнего Востока  
*А.В. Мандрыкина, Е.С. Куликова, А.М. Исмагулов, А.Н. Попов,  
Е.Ю. Терещенко, Е.Б. Яцишина..... 54*

Две террактовые плиты из ГМИИ им. А.С. Пушкина  
*Т.А. Ильина, Е.А. Бойко, О.С. Сеницын, Н.Г. Кравцова, П.В. Гурьева, С. Коваленко,  
К.М. Подурец, Е.Ю. Терещенко, Е.Б. Яцишина..... 55*

Драгоценный металл средневековых городов Крыма  
*А.В. Антипенко, А.Ю. Лобода, Э.А. Хайрединова ..... 56*

Роль физико-химических исследований в научной реставрации  
археологических предметов  
*В.П. Кузнецова..... 57*

Исследования древнерусских крестов-тельников XI–XII вв. изготовленных  
из сплавов системы Pb-Sn и Sn-Pb методами нейтронно-радиационного  
анализа и синхротронной дифракции  
*Э.А. Грешиников, Л.И. Говор, В.А. Куркин, Р.Д. Светогоров ..... 58*

Римские монеты эпохи империи: анализ методом нейтронной томографии  
на Курчатовском нейтронном источнике и элементное картирование  
*М.М. Мурашев, О.А. Кондратьев, Э.А. Грешиников, Е.А. Созонтов ..... 59*

**СЕКЦИЯ 1.5. Развитие ускорительных реакторных технологий,  
приборно-инструментальной базы для оснащения экспериментальных  
станций источников синхротронного излучения и нейтронов ..... 60**

Проект «Разработка и создание элементов экспериментальных станций  
на источниках нейтронов импульсного или постоянного типа».  
Текущее состояние и перспективы  
*В.И. Боднарчук, А.В. Белушкин ..... 61*

Новый источник синхротронного излучения КИСИ-2  
*Е.А. Фомин, В.Н. Корчуганов, А.С. Смыгачева, В.А. Ушаков, А.Г. Валентинов..... 62*

Создание Томского центра компетенций в области пучково-плазменной инженерии и синхротронных исследований <i>М.С. Сыртанов, А.Д. Тересов, В.В. Денисов, Н.Н. Коваль, Н.А. Ратахин, А.Н. Шмаков</i> .....	63
Моделирование нейтронных источников для перспективных источников нейтронов <i>А.И. Попов, Е.А. Кравцов</i> .....	64
Перспективные ядерно-физические технологии на базе синхротронного комплекса ФИАН <i>Н.Н. Колачевский</i> .....	65
Разработка сверхпроводящего вигглера с полем 2.7 Тл и периодом 27 мм для станции «Быстропротекающие процессы» на источнике СКИФ <i>А.А. Седов, Н.А. Мезенцев, С.В. Хрущев, В.М. Цуканов, В.А. Шкаруба</i> .....	66
Когерентная рентгеновская оптика для источников 4-го поколения <i>А.А. Снигирев</i> .....	67
Характеристики излучения проектируемых ондуляторов СИЛА <i>Н.В. Смоляков, А.С. Комлев, Р.Г. Чумаков</i> .....	68
<b>СЕССИЯ 2. Концепция и научная программа синхротронно-лазерного комплекса «СИЛА»</b> .....	<b>69</b>
<b>СЕКЦИЯ 2.1. Концептуальные проекты и научные программы экспериментальных станций первой очереди источника синхротронного излучения</b> .....	<b>69</b>
Проект синхротронной станции «Когерентный нано-анализ» <i>А.Ю. Серегин, П.А. Просеков, В.Г. Кон, М.С. Фоломешкин, А.Г. Куликов, Ю.А. Волковский, Ю.В. Писаревский, А.Е. Благов, М.В. Ковальчук</i> .....	70
Станция нанодифракции на новом источнике синхротронного излучения СИЛА 4+ поколения <i>М.М. Борисов, И.А. Лихачев, Э.М. Пашаев, И.А. Субботин</i> .....	71
Проект экспериментальной станции «Поверхность и интерфейсы» на источнике синхротронного излучения 4-го поколения <i>Н.Н. Новикова, С.Н. Якунин, К.В. Николаев, Л.Р. Муфтахова, А.В. Рогачев</i> .....	72
Проект станции визуализации <i>А.А. Калоян, Е.С. Коваленко, К.М. Подурец</i> .....	73
Экспериментальная станция «Серийная макромолекулярная кристаллография» на источнике синхротронного излучения 4-го поколения «СИЛА» <i>В.А. Лазаренко, П.В. Дороватовский, Р.Д. Светогоров</i> .....	74
Станция «Структурная Кристаллография» синхротронно-лазерного комплекса «СИЛА» <i>Р.Д. Светогоров, Е.С. Куликова, Н.А. Кольшук</i> .....	75
Проект станции малоуглового рентгеновского рассеяния (МУР) на синхротроне «СИЛА» <i>Ю.А. Гапонов, А.А. Велигжанин, Г.С. Петерс</i> .....	76

Станция «Спектроскопия поглощения» <i>А.Л. Тригуб, Е.В. Храмов, А.А. Велигжанин</i> .....	77
Проект станции «Электронная спектроскопия» комплекса «СИЛА» <i>А.М. Лебедев, В.Г. Назин, Р.Г. Чумаков, В.Г. Станкевич</i> .....	78
Станция ядерного резонансного рассеяния и спектроскопии на проектируемом источнике 4-го поколения СИЛА <i>А.Г. Куликов, Н.И. Снегирёв</i> .....	79
Станция магнитного рассеяния <i>О.А. Кондратьев, Р.А. Баулин, Ю.Л. Репченко</i> .....	80
Станция Времяразрешающей диагностики синхротронного источника «СИЛА» <i>А.И. Проценко, В.А. Коржов, А.В. Таргонский, А.Е. Благов, Я.А. Элиович</i> .....	81
<b>СЕКЦИЯ 2.2. Концептуальные проекты и научные программы экспериментальных станций первой очереди лазера на свободных электронах</b> .....	<b>82</b>
Разработка станции высокой плотности энергии для проекта «СИЛА» <i>С.С. Макаров, К.Ф. Бурдонов, А.В. Лобанов, В.В. Кравченко, Г.С. Лагодич, А.А. Набокова, С.А. Пикуз</i> .....	83
Концептуальный проект и научная программа экспериментальной станции ЛСЭ «Когерентная дифракционная визуализация (КДВ)» <i>М.С. Фоломешкин, П.А. Просеков, А.Ю. Серегин, В. Г. Кон, А.Г. Куликов, Ю.А. Волковский, А.В. Таргонский, Ю.В. Писаревский, А.Е. Благов, М.В. Ковальчук</i> .....	84
Концептуальный проект и научная программа экспериментальной станции ЛСЭ «Времяразрешающие эксперименты (ВРЭ)» <i>Ф.С. Пиляк, А.Г. Куликов, В.И. Аккуратов, М.С. Фоломешкин, А.Ю. Серегин, П.А. Просеков, А.В. Таргонский</i> .....	85
Проект станции «Электронная динамика» на лазере свободных электронах «СИЛА» <i>Р.Г. Чумаков, А.А. Андреев</i> .....	86
<b>Микросимпозиум 1. Разработка научной программы развития нейтронных исследований в Российской Федерации</b> .....	<b>87</b>
Состояние работ по созданию нейтронных установок для физики конденсированного состояния на реакторном комплексе ПИК <i>В.В. Тарнавич</i> .....	88
Научные направления в области физики конденсированного состояния на РК ПИК <i>И.А. Зобкало</i> .....	89
Исследования в нейтронном материаловедческом комплексе ИФМ УрО РАН <i>А.Ф. Губкин, В.И. Бобровский</i> .....	90

Ускорительный источник нейтронов VITA для проведения нейтронных исследований <i>М.И. Бикчурина, Т.А. Быков, Г.Д. Верховод, И.С. Ибрагим, А.И. Касатова, Д.А. Касатов, Я.А. Колесников, В.Д. Коновалова, А.М. Кошкарев, А.С. Кузнецов, К.С. Кузьмина, Г.М. Остреинов, В.В. Поросев, С.С. Савинов, Н.Ш. Сингатулина, Е.О. Соколова, И.Н. Сорокин, Т.В. Сычева, С.Ю. Таскаев, Ю.С. Таскаева, А.А. Шуклина, И.М. Щудло, С.В. Щукин</i> .....	91
---	----

## **СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ..... 92**

Возможности нейтронного дифрактометра ДИСК <i>С.С. Агафонов</i> .....	93
--	----

Изучение особенностей микроструктуры сплавов на основе палладия при вариациях элементов легирования <i>О.В. Акимова, Е.С. Куликова</i> .....	94
---	----

Роль переходных металлов (M = Mn, Co, Ni, Cu, Zn) с разными формальными зарядами в формировании локального окружения и кристаллической структуры металл-органических полимеров MBTC <i>И.Д. Акинъшин, Г.М. Кузьмичева, Р.Д. Светогоров, Е.В. Храмов, Р.Г. Чумаков</i> .....	95
--	----

Строение высокопреломляющих оксидных стекол по данным спектроскопии EXAFS и XANES <i>Р.О. Алексеев, Л.А. Авакян, Г.Ю. Шахгильдян, Г.Б. Сухарина, А.М. Ермакова, В.И. Савинков, А.А. Велигжанин, Л.А. Бугаев, В.Н. Сигаев</i> .....	96
---	----

Макет диагностической системы ондулятора с периодом магнитной структуры 27 мм <i>А.А. Амиров, Я.М. Абакумов, Н.В. Смоляков, Д.О. Самсонов, М.А. Колюшенков, А.С. Комлев, Е.Н. Индюшный, А.В. Самарин, А.В. Таргонский, М.Ю. Пресняков</i> .....	97
--	----

Адсорбция дипольных молекул $C_{60}F_{18}$ на диэлектрических поверхностях <i>А.А. Андреев, Р.Г. Чумаков</i> .....	98
---	----

Особенности локального окружения никеля и титана в кристаллах $NiSO_4 \cdot 6H_2O$ , допированных оксидом титана (IV) в виде наночастиц и зольей <i>Л.А. Арбанас, Г.М. Кузьмичева, Е.В. Храмов</i> .....	99
---	----

Высокоразрешающий детектор для визуализации рентгеновского излучения <i>А.Л. Астафьев, М.А. Воеводина, Д.А. Зверев, А.А. Снигирев</i> .....	100
--	-----

Лабораторный испытательный стенд для тестирования рентгеновской оптики и подготовки синхротронных исследований <i>А.А. Баранников, Д.А. Зверев, И.И. Лятун, И.Б. Панормов, А.А. Снигирев</i> .....	101
---	-----

Кластерно-слоистая структура в пленках [Fe/Cr], выявленная методом GISAXS и синхротронной мёссбауэровской спектроскопии <i>Р.А. Баулин, М.А. Андреева, А.В. Рогачев, Ю.Л. Репченко, С.Н. Якунин</i> .....	102
--	-----

Биогибридный материал на основе клеток <i>E.coli</i> и белка Dps по данным синхротронных исследований и электронной микроскопии <i>Е.А. Беликов, С.С. Антипов, Е.В. Паринова, А.К. Пелагина, О.А. Чувенкова, С.Ю. Требунских, В. Сиваков, Р.Г. Чумаков, А.М. Лебедев, К.А. Фатеев, С.Ю. Турищев</i> .....	103
--	-----

Влияние материала подложки на формирование магнитных свойств ультратонких периодических многослойных систем Ду-Со <i>А.О. Беляева, И.А. Субботин, М.В. Макарова, Е.А. Кравцов, Э.М. Пашаев</i> .....	104
Синхротронные исследования эпитаксиальных структур олово-кремний <i>Н.И. Бойков, О.А. Чувенкова, Е.В. Парина, С.И. Курганский, М.Д. Манякин, Р.Г. Чумаков, А.М. Лебедев, А. Макарова, Д. Смирнов, Р. Овсянников, С.Ю. Турицев</i> .....	105
Экспериментальная станция «ФАЗА» на Курчатовском источнике синхротронного излучения <i>М.М. Борисов, Э.Х. Мухамеджанов</i> .....	106
Влияние легирующих элементов на фазовые превращения фуллеренов при высоких давлениях <i>П.А. Борисова, М.С. Блантер</i> .....	107
Нейтронные исследования доменной структуры сегментированных полиуретанов и магнитной подрешетки композитных материалов на их основе <i>А.Н. Бугров, Б.В. Васильев, Р.Ю. Смыслов, Ю.Е. Горшкова, А.А. Павлова, Г.П. Копица, В.В. Рунов</i> .....	108
Исследование зависимости откручивания ДНК от нуклеосом в зависимости от последовательности и длины ДНК методом малоуглового рассеяния рентгеновского излучения <i>В.А. Васильев, Н.А. Моторин, Д.А. Афонин, Г.С. Петерс, А.В. Моисеенко, Г.А. Армеев, А.К. Шайтан</i> .....	109
Определение углового разрешения станции БиоМУР по данным малоуглового рассеяния на искусственных опалах <i>А.А. Велигжанин, Г.С. Петерс</i> .....	110
Динамика укладки хроматина в ядрах клеток линии аденокарцинома Эрлиха с индуцированным радиорезистентным фенотипом <i>В.С. Бурдаков, И.А. Кулаков, Л.А. Иванова, Ю.Е. Горшкова, Г.П. Копица, Д.В. Лебедев, Ал.А. Богданов, Н.А. Верлов</i> .....	111
Применение методов машинного обучения к определению локальной атомной структуры ионов (наноструктур) серебра в цинк-фосфатных матрицах/стеклах <i>И.В. Викленко, В.В. Срабионян, В.А. Дурыманов, Я.Н. Гладченко-Джевелекис, В.Н. Раздоров, Д.С. Рубаник, Л.А. Авакян, Л.А. Бугаев</i> .....	112
Станция рентгеновской топографии и микротомографии РТ-МТ <i>А.А. Гогин</i> .....	113
Структурные исследования процессов олигомеризации геном-ассоциированных белков HU и IHF <i>А.М. Гордиенко, Л.А. Дадинова, А.А. Можсаев, М.В. Петухов, В.А. Манувера, В.Н. Лазарев, Т.В. Ракитина, Г.С. Петерс, Э.В. Штыкова</i> .....	114
Определение структурных параметров ближнего окружения железного центра молекулы гемоглобина путём квантово-химического анализа XANES спектров <i>А.В. Горячевский, А.А. Велигжанин, Л.П. Суханов, А.Л. Тригуб</i> .....	115

Статус создания станции 1–2 «структурная диагностика» ЦКП «СКИФ» <i>В.В. Денисов, С. Винокуров, Я.В. Зубавичус, А.Н. Шмаков, Д.Д. Мищенко, А.Г. Селютин, С.С. Ковальский, К.В. Бескончин, А.Д. Тересов, М.С. Сыртанов, В.Н. Киселев, А.А. Евдокимов, Ю.Н. Панченко, М.В. Андреев</i> .....	116
Текущие экспериментальные возможности экспериментальной станции «Белок/РСА» Курчатовского источника синхротронного излучения и обзор ярких результатов, полученные в 2022/2023 годах <i>П.В. Дороватовский, В.А. Лазаренко, Р.Д. Светогоров</i> .....	117
Разработка и исследование перспективных материалов и наноструктур для технологии безмасочной рентгеновской нанолитографии, применимой к созданию новой компонентной базы микро- и наноэлектроники с использованием источника синхротронного излучения <i>Н.А. Дюжнев, М.А. Махиборода, Т.С. Рындина, В.А. Беспалов</i> .....	118
Магнитная структура монокристаллов $(\text{Ni}, \text{Mn}, \text{Cu})_3\text{BO}_5$ <i>Р.М. Еремина, Е.М. Мошкина, В.А. Шустов</i> .....	119
Синтез и структурные особенности сегнетоэлектрических материалов по данным рентгеновской спектроскопии <i>А.М. Ермакова, Е.В. Глазунова, Е.Е. Поносова, Э.И. Шеметова, Г.Б. Сухарина, Л.А. Авакян, Л.А. Бугаев</i> .....	120
О преобразованиях гамма – нейтронных потоков в электросигналы в биоморфных микроканальных матрицах <i>Н.В. Классен, А.Е. Ершов, А.В. Лазарева</i> .....	121
Перспективные технологии тераностики на базе отечественного комплекса протонной терапии «Прометеус» <i>И.Н. Завестовская</i> .....	122
Методика исследования структуры монокристаллов на станции МОНД реактора ИР-8 <i>Н.Н. Исакова, А.И. Калюканов</i> .....	123
Метод импульсных измерений магнитного поля ондуляторов <i>Ф.П. Казанцев, П.В. Каноник, Н.А. Мезенцев, В.А. Шкаруба</i> .....	124
Локализация нанокристаллов меди в пористой матрице $\text{SiO}_2$ по данным синхротронных исследований XANES и электронной микроскопии <i>Ю.С. Какулия, Е.В. Паринава, Е.Ю. Канюков, V. Sivakov, С.В. Канькин, Т. Ляйтнер, Р. Овсянников, С.Ю. Турищев</i> .....	125
Исследование реальной структуры кристаллов методами рентгеновской топографии на Курчатовском источнике синхротронного излучения <i>А.А. Калоян, Е.С. Коваленко, К.М. Подурец</i> .....	126
Нейтронный дифрактометр СТРЕСС на реакторе ИР-8 <i>И.Д. Карпов, В.Т. Эм</i> .....	127
Простая компьютерная программа для расчета магнитного поля ондулятора <i>Н.В. Смоляков, Н.С. Клочков</i> .....	128

Станция рентгеновской томографии на канале 6.3 Курчатовского источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» <i>Е.С. Коваленко, А.А. Калоян, К.М. Подурец</i> .....	129
Кристаллизация $\alpha$ -L-фукозидазы из мицелиального гриба <i>Fusarium proliferatum</i> LE1 для рентгеноструктурного анализа <i>С.А. Корбан, А.А. Чеблоков, А.А. Кульминская, К.С. Бобров</i> .....	130
Реализация временного разрешения рентгеновских методов исследования на станции ПРО «КИСИ-Курчатов» <i>В.А. Коржов, А.И. Проценко, Я.А. Элиович, А.В. Таргонский, А.Е. Благов</i> .....	131
Микрофокусировка рентгеновского излучения преломляющими линзами на станции «Микрофокус» <i>А.С. Коротков, А.А. Баранников, Г.В. Пруцков, А.А. Снигирев</i> .....	132
Компактный трансфокатор для рентгеновских источников нового поколения <i>А.С. Коротков, А.С. Нарикович, Д.А. Зверев, И.И. Лятун, А.А. Баранников, И.Б. Панормов, А.А. Снигирев</i> .....	133
Сравнительное исследование атомно-электронного строения комплекса [Ni(Salen)] и его полимера в различном зарядовом состоянии по данным XPS и XAFS <i>П.М. Корусенко, Е.В. Храмов, О.В. Петрова, А.А. Верецагин, О.В. Левин, Д.В. Сивков, К.А. Бакина, Р.Н. Скандаков, В.А. Гаас, А.С. Виноградов</i> .....	134
Влияние локального окружения ионов титана на каталитические свойства титансодержащих цеолитов типа MFI <i>Г.В. Кравченко, Е.Н. Доморощина, Г.М. Кузьмичева, Е.В. Храмов, Л.В. Пирютко</i> .....	135
Спектроскопия рентгеновского поглощения в исследовании физико-химических форм урана <i>А.Д. Крот, А.Л. Тригуб, И.Э. Власова</i> .....	136
Окислительно-восстановительное поведение Pu(VI) и Pu(V) в водных растворах <i>А.С. Кузенкова, А.Ю. Романчук, Р.Д. Светогоров, А.Л. Тригуб, С.Н. Калмыков</i> .....	137
DARIA - Компактный источник нейтронов для фундаментальных исследований и прикладных задач <i>Т.В. Кулевой</i> .....	138
Порошковая дифракция высокого разрешения на станции «Белок/РСА» Курчатовского источника синхротронного излучения <i>Е.С. Куликова, Р.Д. Светогоров</i> .....	139
Низкотемпературная ячейка <i>Г.М. Лаврушин</i> .....	140
Влияние высокого давления на кристаллическую, магнитную структуру и колебательные спектры квазидвумерных ван-дер-ваальсовых соединений <i>О.Н. Лис, Д.П. Козленко, С.Е. Кичанов, Е.В. Лукин, И.Ю. Зель</i> .....	141

Модификация кристаллической структуры сверхрешёток Fe/Gd в результате гидрирования <i>И.А. Лихачёв, И.А. Субботин, Ю.М. Чесноков, О.А. Кондратьев, А.Л. Васильев, Е.А. Кравцов, Э.М. Пашаев</i> .....	142
Взаимодействие водного раствора $ZnCl_2$ низкой концентрации с ленгмюровским монослоем арахидиновой кислоты как модель процессов в биологических мембранах: теоретический анализ спектров XANES <i>В.Ю. Лысенко, М.А. Кременная, Н.Н. Новикова, А.В. Рогачев, С.Н. Якунин, Г.Э. Яловега</i> .....	143
Алмазная рентгеновская микрооптика <i>И.И. Лятун, С.Н. Шевырталов, А.С. Коротков, В.А. Юнкин, А.А. Снигирев</i> .....	144
Исследование структуры кристаллов-суперпротонов <i>И.П. Макарова, Н.Н. Исакова, А.И. Калюканов, В.А. Коморников</i> .....	145
Исследования структурной реорганизации ультратонких функциональных материалов на основе лантаноидов <i>Н.Н. Новикова, Г.М. Кузьмичева, Ю.Н. Малахова, Е.А. Сетяева, К.В. Николаев, Л.Р. Муфтахова, Н.Е. Малышева, А.В. Рогачев, С.Н. Якунин</i> .....	146
Синтез углеродных покрытий на наночастицах металлов <i>Ю.А. Саламатов, В.В. Матюхов, Е.А. Кравцов</i> .....	147
Электронная структура твёрдых растворов $Nb_{1-x}V_xSe_2$ по данным XPS и SPEM <i>А.И. Меренцов, А.С. Шкварин, Е.М. Шерокалова, I. Pis, F. Bondino, А.Н. Тутов</i> .....	148
Станция нейтронной визуализации ДРАКОН <i>М.М. Мурашев, В.П. Глазков, В.Т. Эм, Р.А. Садыков, Д.Н. Трунов, С.Н. Аксенов</i> .....	149
Функциональные магнитоактивные металлополимерные кобальт-, никель- и железосодержащие наноматериалы, синтезированные из ненасыщенных дикарбоксилатов <i>В.Ю. Мусатова, С.А. Семенов, Г.И. Джардималиева, О.Д. Смирнова</i> .....	150
Особенности состава, строения и свойств металл-органических полимеров MIL-100(Fe) <i>А.Г. Муштаков, Е.Б. Маркова, Г.М. Кузьмичева, И.С. Павлов, А.Л. Васильев, П.В. Конарев</i> .....	151
Исследование электронной структуры 4f магнитного соединения $EuSi_2$ <i>В.Г. Назин, А.М. Лебедев, Л.Л. Лев, Р.Г. Чумаков, Д.В. Аверьянов, И.С. Соколов, О.Е. Парфенов, О.А. Кондратьев, А.М. Токмачев, В.Г. Сторчак</i> .....	152
Ультракомпактный трансфокатор на основе рентгеновских преломляющих линз <i>А.С. Нарикович, И.И. Лятун, Д.А. Зверев, И.Б. Панормов, А.А. Лушников, А. А. Баранников, А.С. Коротков, А.А. Снигирев</i> .....	153
Изменение проводящей структуры полианилина при допировании переходными металлами <i>О.В. Недоедова, В.А.Шматко, В.Ю. Лысенко, Г.Э. Яловега</i> .....	154

Синхротронные исследования висмутсодержащих пирохлоров, допированных атомами 3d-металлов <i>С.В. Некипелов, Н.А. Жук, О.В. Петрова, Д.В. Сивков, К.А. Бакина, Р.Н. Скандаков, В.О. Рутковский, А.М. Лебедев, Р.Г. Чумаков, В.Н. Сивков</i> .....	156
Спектроскопия рентгеновского поглощения в лаборатории и на синхротроне: преимущества и недостатки <i>Д.А. Новичков, А.Л. Тригуб, Е.А. Гербер, Ю.М. Неволин, А.Ю. Романчук, П.И. Матвеев, С.Н. Калмыков</i> .....	157
Киральный спиновый ближний порядок в геликоидальных ферромагнетиках с нецентросимметричной кубической структурой (на примере MnSi) <i>А.А. Повзнер, Т.А. Ноговицына, Э.И. Лопатко, А.Г. Волков</i> .....	158
Топологические электронные переходы в киральных ферромагнетиках FeMnSi с кубической структурой без центра инверсии <i>Т.М. Нуретдинов, А.А. Повзнер, Э.И. Лопатко, Т.А. Ноговицына</i> .....	159
Синтез биметаллического комплекса [PtRu <sub>2</sub> (FcCOO) <sub>2</sub> ] и исследование методом EXAFS продуктов его термораспада – предшественников каталитически активных функциональных наноматериалов <i>Н.К. Огаркова, А.С. Попова, Н.С. Смирнова, Е.В. Храмов, И.А. Якушев</i> .....	160
Новые подходы в СИ-томографии суставов с помощью рентгено-контрастных наночастиц и лазерного излучения <i>А.И. Омельченко, К.М. Подурец, И.Г. Дьячкова, Д.В. Золотов</i> .....	161
Пространственно-временные изменения атомно-молекулярной архитектуры костной ткани. Перспективы развития новых технологий <i>А.А. Павлычев, К.О. Брыкалова, А.В. Корнеев, Н.Н. Корнилов, А.А. Черный</i> .....	162
Синхротронные исследования структур нитевидного кремния <i>А.К. Пелагина, Е.В. Парина, О.А. Чувенкова, Д.А. Коюда, Д. Смирнов, А. Макарова, Р. Овсянников, Д. Ермухамед, Т. Минг, В. Сиваков, С.Ю. Турицев</i> .....	163
Развитие метода малоуглового рентгеновского рассеяния для анализа структуры слабоупорядоченных систем на синхротронной станции «БиоМУР» <i>Г.С. Петерс, П.В. Конарев, В.В. Волков, А.А. Велигжанин, М.А. Марченкова, Ю.В. Писаревский</i> .....	164
Изучение конформационного разнообразия олигопептидазы В методами рентгеноструктурного анализа, малоуглового рентгеновского рассеяния и молекулярной динамики <i>Д.Е. Петренко, Г.С. Петерс, Ю.А. Гапонов, В.И. Тимофеев, Т.В. Ракитина</i> .....	165
Определение валентного состояния урана с использованием XANES спектроскопии для прогноза миграции техногенного урана в условиях окружающей среды <i>Т.Р. Полякова, А.Л. Тригуб, И.Э. Власова</i> .....	166

Исследование электронной структуры редкоземельных интерметаллидов $\text{ErNi}_{5-x}\text{Cu}_x$ ( $x = 0, 1, 2$ ) методом резонансной фотоэмиссионной спектроскопии с использованием синхротронного излучения <i>Е.А. Пономарева, В.И. Гребенников, А.Г. Кучин, Т.В. Кузнецова</i> .....	167
Термическая устойчивость $\text{CuZrSe}_2$ и $\text{CuCrSe}_2$ <i>М.С. Постников, А.С. Шкварин, А.А. Титов, Е.Г. Шкварина, А.Н. Титов</i> .....	168
Станция «Микрофокус» Курчатовского источника синхротронного излучения <i>Г.В. Пруцков</i> .....	169
Станция НКР – Наносистемы и когерентное рассеяние на Курчатовском источнике синхротронного излучения <i>Ю.Л. Репченко, Р.А. Баулин, Э.Х. Мухамеджанов, С.Н. Якунин</i> .....	170
Синхротронная экспериментальная станция «Ленгмюр» <i>Н.Н. Новикова, С.Н. Якунин, А.В. Рогачев</i> .....	171
Композитные материалы на основе алмаза для детектирования ионизирующего излучения <i>Е. Рубцова, И. Каменских, И. Шпильков, В. Седов, С. Кузнецов, В. Ральченко</i> .....	172
Нейтроннография магнитной спирали монокристалла гексаферрита $\text{BaCo}_2\text{Ti}_2\text{Fe}_8\text{O}_{19}$ типа М в сильном магнитном поле <i>Р.А. Садыков</i> .....	173
Применение эффекта Косселя для структурной диагностики периодических многослойных наносистем для проведения времязрешающих исследований на источниках синхротронного излучения с высокой яркостью <i>А.И. Сафонов, К.В. Николаев, И.А. Субботин, С.Н. Якунин</i> .....	174
Об информативности спектроскопии продуктов эрозии первой стенки термоядерных установок на основе вольфрама и углерода <i>Н.Ю. Свечников, В.Г. Станкевич</i> .....	175
Использование фотонного монитора положения пучка при определении положения электронного пучка в накопителе «СИБИРЬ-2» <i>А.А. Сенкевич</i> .....	176
Станция РКФМ. Новый метод экспериментального определения размера пучка в фокусе для составной преломляющей линзы <i>А.Ю. Серегин, М.С. Фоломешкин, В.Г. Кон, Ю.А. Волковский, П.А. Просеков, В.А. Юнкин, Д.А. Зверев, А.А. Баранников, А.А. Снигирев, Ю.В. Писаревский, А.Е. Благов, М.В. Ковальчук</i> .....	177
Разработка экспериментального стенда для получения поляризованных нейтронов на реакторе ИР-8 <i>Е.О. Серов, А.И. Калюканов, В.И. Боднарчук, С.С. Агафонов</i> .....	178
Применение информационных технологий для выбора солей и растворов $\text{RE}(\text{NO}_3)_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ( $\text{RE} = \text{La-Lu, Y, Sc}$ ) с оптимальными структурными характеристиками и биоцидными свойствами <i>Е.А. Сетьяева, А.А. Глушко, Г.М. Кузьмичева, А.А. Незнанов, Р.П. Терехова, Р.Д. Светогоров</i> .....	179

Взаимопроникающие полимерные сетки на основе бактериальной целлюлозы и поли-1-винил-1,2,4-триазола: изучение надмолекулярной структуры методами малоуглового рассеяния <i>Р.Ю. Смыслов, Г.П. Копица, А.И. Емельянов, К.В. Ездакова, Ю.Е. Горшкова, С.А. Коржова, Н.В. Цвигун, А.Е. Соколов, А.К. Хрипунов, А.Е. Баранчиков</i> .....	180
Синхротронные центры – смена парадигмы использования: не только диагностика, но и разработка перспективных наноматериалов <i>А.В. Солдатов, А.А. Гуда, М.А. Солдатов, И.А. Панкин</i> .....	181
Устройство двумерной фокусировки рентгеновского излучения на основе планарных кремниевых составных преломляющих линз <i>М.Н. Сороковиков, Д.А. Зверев, А.А. Баранников, В.А. Юнкин, А.Ю. Серегин, Ю.А. Волковский, П.А. Просеков, А.А. Снигирёв</i> .....	182
Рентгеновская диагностика монокристаллических материалов в условиях воздействия внешнего магнитного поля <i>Н.И. Снегирёв, А.Г. Куликов, И.С. Любутин, Ф.С. Пиляк, А.Ю. Серегин, С.В. Ягунов, М.Б. Стругацкий</i> .....	183
Установление кристаллической структуры гетерометаллического 2D спин-переменного полимера $K[Fe(5-Cl-thsa)_2]$ <i>Н.Г. Спицына, М.А. Благов, А.С. Лобач, В.А. Лазаренко, Р.Д. Светогоров, Я.В. Зубавичус</i> .....	184
Центры окраски Ag, Au, Rb, Nd, Er в цинк-фосфатных стеклах, полученных методом закалки из расплава: атомная структура и оптические свойства <i>В.В. Срабионян, М.П. Ветчинников, Е.М. Зинина, Д.С. Рубаник, В.А. Дурьманов, И.А. Викленко, Ю.Ю. Дмитриев, Е.В. Храмов, А.А. Велигжанин, Л.А. Авакян, Г.Ю. Шахгильдян, В.Н. Сигаев, Л.А. Бугаев</i> .....	185
Исследования продуктов реакций (n, f), (n, $\gamma$ ), ( $\gamma$ , f) и ( $\gamma$ , xn, p) в образцах $X^{209}Bi, ^{238}U, ^{237}Np$ на ускорителя ОИЯИ НУКЛОТРОН, ФАЗОТРОН и ЛИНАК-200 <i>С.И. Тютюнников, В.И. Стегайлов, В.А. Рахимова</i> .....	186
Синтез гетерометаллического комплекса платины, исследование его термических превращений и каталитические свойства полученного нанесенного катализатора Pt/Zn/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <i>О.В. Сулимова, Н.С. Смирнова, И.А. Якушев</i> .....	187
Локальная атомная структура активных центров медьсодержащих цеолитов типа MOR <i>Г.Б. Сухарина, А.М. Ермакова, Я.Н. Гладченко-Джевелекис, К.Д. Кулаев, Е.Е. Поносова, Э.И. Шеметова, Л.А. Авакян, В.В. Прядченко, Л.А. Бугаев</i> .....	188
Возможности современных теоретико-групповых методов в решении кристаллографических задач теории фазовых переходов <i>М.В. Таланов</i> .....	189
Композиты в системе «цеолиты типов MFI и BEA–соли $Ln(NO_3)_3 \cdot xH_2O$ ( $Ln = La, Gd$ )». Получение. Состав. Строение. Антимикробные свойства <i>Д.А. Тарханова, Г.М. Кузьмичева, Р.П. Терехова, Р.Д. Светогоров</i> .....	190

Исследование объектов культурного наследия на установке нейтронной радиографии и томографии ИЯФ АН РУз <i>М.Ю. Ташметов, Н.Б. Исмаев, Ж.Б. Хакимов, С.М. Адизов</i> .....	191
Применение синхротронных методов для изучения структуры смешанных карбонатов $Np(V)$ <i>А.С. Кузенкова, Ю.А. Тетерин мл., Е.С. Куликова, А.Л. Тригуб, М.Д. Шаульская, Д.М. Цымбаренко, Т.В. Плахова, А.Ю. Романчук, С.Н. Калмыков</i> .....	192
Использование пространственных структур белков для разработки пептидных вакцин <i>В.И. Тимофеев</i> .....	193
Синхротронные исследования для оптимизации процесса формирования нано-био-гибридных структур и комплексов на основе наночастиц пористого кремния <i>С.С. Титова, У.А. Цурикова, Л.А. Осминкина, Р.Г. Чумаков, А.М. Лебедев, А.А. Кудрявцев, С.В. Канныкин, А.И. Чукавин, А.Н. Бельтюков, Ю.С. Какулия, Е.В. Паринава, О.А. Чувенкова, С.Ю. Турицев</i> .....	194
Атомное и электронное строение допированных азотом кластеров нано-графена по данным комбинированного анализа методами XPS и XANES <i>Д.Б. Толчина, Л.А. Авакян, В.В. Срабионян, А.Т. Гюласарян, А.Т. Козаков, А.В. Никольский, А.В. Емельянов, Р.Г. Чумаков, Э.Г. Шароян, А.С. Манукян, Л.А. Бугаев</i> .....	195
От гелей до покрытий на основе коллагена: синтез, строение и биологическая активность <i>А.Н. Третьякова, А.В. Наумкин, Э.В. Штыкова, А.Ю. Васильков</i> .....	196
Экспериментальное исследование сбоеустойчивости цифровых интегральных схем при облучении на плутоний-бериллиевом источнике <i>П.А. Александров, Е.В. Ефименко, П.Ю. Макаев, Е.И. Уксусов, С.С. Фанченко</i> .....	197
Особенности атомного и электронного строения нитевидных кристаллов $SnO_2$ по данным синхротронных исследований <i>К.А. Фатеев, О.А. Чувенкова, С.В. Рябцев, С.Ю. Турицев</i> .....	198
Количественный анализ дисперсных фаз титанового псевдо $\beta$ -сплава на основе комплексного использования дифракции и рассеяния нейтронов, электронов и рентгеновского излучения <i>С.Н. Петров, Н.Ф. Дроздова, М.Л. Федосеев, М.С. Михайлов, Е.В. Забавичева</i> .....	199
Ультразвуковое исследование и молекулярное моделирование упругих свойств пропиленгликоля при давлениях до 1.4 ГПа <i>Ю.Д. Фомин, И.В. Данилов, Е.Л. Громницкая</i> .....	200
Экспериментальная станция «Структурное Материаловедение» – СТМ <i>Е.В. Храмов, А.А. Велигжанин, А.Л. Тригуб, Н.А. Кольшикин</i> .....	201
Влияние разных методов сушки на организацию надмолекулярной структуры нативной бактериальной целлюлозы <i>Н.В. Цвигун, Л.А. Иванова, Р.Ю. Смыслов, Х.Э. Ёров, Ю.Е. Горшкова, А.Е. Баранчиков, А.К. Хрипунов, А.А. Кульминская, Г.П. Копица</i> .....	202

Сцинтилляционные матрицы для микроскопии структурных процессов <i>Н.В. Классен, И.С. Цебрук, С.А. Винокуров</i> .....	203
Влияние состава наногранул на структурные и мемристивные свойства металл-диэлектрических композиций <i>К.Ю. Черноглазов, Р.Г. Чумаков, Е.В. Храмов, А.В. Ситников, В.А. Демин, В.В. Рыльков</i> .....	204
Интеркаляция анионных малонатов меди и хрома в слоистый гидроксид иттрия <i>Е.Д. Шейченко, А.Д. Япрынци, Н.В. Гоголева</i> .....	205
Влияние окта и тетра заполнения на электронную структуру в $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$ и $\text{Cr}_x\text{ZrSe}_2$ <i>А.С. Шкварин, А.И. Меренцов, М.С. Постников, Е.Г. Шкварина, А.Н. Титов</i> .....	206
Молекулярная динамика для проектирования наносистем в современной микроэлектронике <i>Е.А. Шрамков, Р.Г. Чумаков</i> .....	207
Анализ агрегационного состояния магнитных жидкостей на основе анизотропного малоуглового рассеяния рентгеновских лучей <i>А.В. Шульгина, М.В. Авдеев, А.А. Велигжанин, Г.С. Петерс</i> .....	208
Ультрамалоугловое рассеяние нейтронов на реакторе ИР-8: статус и перспективы <i>Е.В. Яковенко</i> .....	209
Влияние межфазных взаимодействий в системе NiOx-графеновая плоскость на формирование проводящей структуры в гибридных нанокompозитных материалах для суперконденсаторов <i>Г.Э. Яловега, И.В. Еришов, М. Brzhezinskaya, В.А. Шматко, В.О. Дмитриев</i> .....	210
Синтез и свойства Mo- и W-содержащих катализаторов на основе цеолита со структурой MFI <i>Б.Ю. Янжимаев, А.А. Велигжанин</i> .....	211

## **СЕССИЯ 1**

**Актуальные исследования и разработки, выполняемые  
на источниках синхротронного излучения и нейтронов,  
а также комплексах ядерной медицины**

### **СЕКЦИЯ 1.1**

**Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области материаловедения для развития наукоемких  
производственных технологий  
[конструкционные материалы]**

Председатель: *Белушкин А.В.*

# ПРИМЕНЕНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

**Р.В. Сундеев<sup>1,2,3</sup>, А.В. Шалимова<sup>2</sup>, А.А. Велигжанин<sup>4</sup>, А.М. Глезер<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>РТУ МИРЭА

<sup>2</sup>ФГУП «ЦНИИЧермет имени И.П. Бардина»

<sup>3</sup>НИТУ «МИСис»

<sup>4</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Важной и актуальной задачей современного физического материаловедения является создание инновационных материалов обладающих сложным комплексом физических, механических, химических и др. свойств. Одним из перспективных направлений повышения физико-механических свойств материалов является создание в них новых неравновесных структурно-фазовых состояний методами экстремальных воздействий: закалка из жидкого состояния (ЗЖС) и больших пластических деформаций, в частности деформация кручением под высоким квазигидростатическим давлением (КВД). Метод ЗЖС состояния является наиболее распространенным способом для получения аморфного состояния металлических сплавов. Однако, аморфное состояние можно также получить и в процессе различных видов больших пластических деформаций кристаллических материалов. Применение метода EXAFS-спектроскопии при использовании синхротронного рентгеновского излучения способно решить существующие проблемы идентификации атомной структуры аморфных сплавов и выявить влияние структурных параметров сплава на комплекс их физико-механических свойств.

В данной работе была предпринята попытка установить возможные несоответствия в локальной атомной структуре аморфного сплава  $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ , полученного различными способами (ЗЖС и КВД). Метод EXAFS-спектроскопии показано, что локальная атомная структура аморфных фаз, полученных методами ЗЖС и КВД, не идентична. Локальная атомная структура аморфного состояния, полученная методом КВД, изменяется в зависимости от величины деформации. Как после КВД, так и после ЗЖС, обнаружена различная степень ближнего порядка для окружения атомов Cu и Ni. Более высокая степень ближнего порядка имеет место вокруг атомов Cu.

С использованием метода EXAFS-спектроскопии проанализированы закономерности влияния больших пластических деформаций при криогенной температуре на структуру аморфных сплавов, полученных ЗЖС. Установлено влияние режимов КВД на характер локального атомного окружения атомов железа и никеля. Выявлена корреляция между значениями удельной намагниченности насыщения и параметрами локальной атомной структуры.

# НАПЫЛЕНИЕ АМОРФНЫХ ПЛЕНОК ОКСИДА ВАНАДИЯ ЭЛЕКТРОННЫМ ЛУЧОМ В КИСЛОРОДНОЙ АТМОСФЕРЕ

**Е.В. Таркаева<sup>1</sup>, В.А. Иевлева<sup>1,2</sup>, А.И. Дулебо<sup>1</sup>,  
А.В. Муратов<sup>1</sup>, А.Ю. Кунцевич<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики

Кристаллический  $\text{VO}_2$  испытывает фазовый переход из моноклинной в тетрагональную кристаллическую решетку при  $68\text{ }^\circ\text{C}$ . Вблизи перехода материал обладает высоким температурным коэффициентом сопротивления (ТКС) порядка  $-3\text{-}5\%/^\circ\text{K}$ , но в данном материале имеется гистерезис на кривых зависимости сопротивления от температуры. Данное явление ограничивает его практическое применение, например, в болометрах. Аморфный  $\text{VO}_x$  не имеет гистерезиса и, варьируя концентрацию кислорода, возможно добиться ТКС около  $-2\%/^\circ\text{K}$ .

Самыми распространенными методами получения пленок оксида ванадия являются реактивное магнетронное напыление и отжиг пленок металлического ванадия.

В данной работе мы демонстрируем новый [1] метод выращивания аморфного  $\text{VO}_x$  с ТКС  $-2\%/^\circ\text{K}$  – напыление электронным лучом металлического ванадия в кислородной атмосфере. Преимуществами данного метода являются отсутствие необходимости нагрева подложки, что позволяет совмещать напыление с литографией, и слабая зависимость состава пленки от материала подложки. Исследовалось влияние всех контролируемых параметров роста: температуры подложки, скорости испарения ванадия и потока кислорода.

Образцы были изучены систематически с помощью следующих методик: транспортных ( $R(T)$ ), оптических (эллипсометрия), рамановской спектроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Мы предполагаем, что оксидация ванадия в основном происходит в процессе распыления в камере, а не на подложке. Также эти пленки являются стабильными при термоциклировании и сохраняют свои свойства на воздухе в течение долгого времени.

Актуальной задачей является определение степени окисления в полученной пленке  $\text{VO}_x$  методами XRD и EXAFS/XANES на источнике синхротронного излучения.

[1] Amorphous VOX films with high temperature coefficient of the resistivity grown by reactive e-beam evaporation of V metal, E.V. Tarkaeva, V.A. Ievleva, A.I. Duleba, A.Yu. Kuntsevich (2023) arXiv:2309.0703.

# СТРУКТУРА ГИДРИДНЫХ ФАЗ НА ОСНОВЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ И ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ

**С.А. Лушников<sup>1</sup>, Т.В. Филиппова<sup>1</sup>, С.С. Агафонов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский Институт»

Интерметаллические соединения и некоторые сплавы способны обратимо абсорбировать значительное количество водорода и являются перспективными материалами для его безопасного и компактного хранения [1]. Для этой цели является актуальной группа интерметаллидов с гексагональной (C14) и кубической (C15) структурой фаз Лавеса на основе титана и циркония, гидриды которых содержат около двух массовых процентов водорода [2]. Не меньший интерес представляют гидридные фазы на основе соединений состава  $RT_5$  и  $RT_3$  (R-редкоземельный металл, T-d-металл), которые обладают уникальными магнитными свойствами [3]. Кроме того, гидриды этих соединений можно использовать в качестве материалов для никель-металл гидридных аккумуляторов. В последнее время внимание исследователей сфокусировано на группе высокоэнтропийных сплавов, которые имеют ценные свойства — жаропрочность, коррозионную стойкость и биосовместимость [4]. Типичным представителем таких сплавов являются сплавы с объемно-центрированной кубической решеткой. В узлах решетки статистически расположены атомы Ti, Zr, Mo, Nb и Ta в соотношении, близком к эквивалентному. Гидриды на основе этих сплавов пока мало исследованы [5]. Для всех рассмотренных групп соединений и гидридных фаз очень важной является информация об их структуре. Наиболее надежным способом изучения структуры гидридов интерметаллидов является метод дифракции нейтронов. В настоящей работе представлены исследования по особенностям структуры гидридных фаз на основе интерметаллидов NbVCo, ZrMo<sub>2</sub> с гексагональной и кубической фазами Лавеса. Также были изучены с помощью методов рентгеновской и нейтронной дифракции гидридные фазы на основе высокоэнтропийных сплавов с разной структурой, такие как Ti<sub>0.5</sub>Zr<sub>0.5</sub>FeCr и TiZrNbMoTa.

[1] M. Latroche, A. Percheron-Guegan, J. Alloys Compd. 356-357, 461 (2003).

[2] S.M. Filipek, A. Percheron-Guegan A, et al., J. Phys. Condens. Matter. 14, 11261e4 (2002).

[3] K.H.J. Buschow, J. Less. Comm. Met. 72, 257 (1980).

[4] P. Qin, Y. Liu, T. B. Sercombe, et al., ACS Biomater. Sci. Eng. 4, 2633 (2018).

[5] C. Zlotea, M. A. Sow, G. Ek et al., J. Alloys and Compd. 775, 667 (2019).

## СЕКЦИЯ 1.1

**Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области материаловедения для развития наукоемких  
производственных технологий  
[материалы и изделия для ядерной и термоядерной  
энергетики, термоэлектрических и  
сверхпроводящих материалов]**

Председатель: *Белушкин А.В.*

# РАЗРАБОТКА ФОТОМЕМРИСТИВНЫХ УСТРОЙСТВ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ОКСИДА ГРАФЕНА И ПЕРСПЕКТИВЫ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ИХ ФОТОНАВЕДЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ И СТРУКТУРНЫХ ПЕРЕХОДОВ

**Н.Д. Митюшев<sup>1,2</sup>, Г.Н. Панин<sup>2</sup>, А.Н. Баранов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова*

<sup>2</sup>*ИПТМ РАН*

В настоящее время слоистые 2D материалы, такие как графен, оксид графена и др., привлекают большое внимание разработчиков микро- и оптоэлектронных устройств из-за их уникальных химических и физических свойств, необходимых для создания двумерных мемристоров-нового типа логических переключателей и памяти [1, 2]. Такие переключающие и запоминающие двухэлектродные устройства энергонезависимы и могут быть встроены в КМОП технологию, существенно улучшив параметры современных интегральных схем. Кроме того, модификация двумерных материалов с помощью наночастиц и квантовых точек может контролировать их фотомемристивные состояния [3, 4], что дает возможность запоминать и обрабатывать как электронные, так и оптические сигналы [5].

Для модификации оксида графена в данной работе было проведено восстановление полученной пленки в гидротермальных условиях гидразином, замещение кислородных групп на фторидные с целью контроля электронной структуры и повышения химической и термической стабильности, а также встраивание в структуру углеродных наночастиц для контроля фоточувствительности полученной структуры в широком диапазоне электромагнитного излучения.

Полученные результаты указывают на возможность контроля фотомемристивных состояний в модифицированном оксиде графена в широком диапазоне, длин волн и электрических возбуждений. В изучении механизмов формирования таких фотонаведенных электронных состояний и структурных переходов могут помочь синхротронные исследования методами фотоэлектронной спектроскопии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №23-49-00159.

[1] Панин Г. Н., // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника 2018. 1 (169), с. 23–41.

[2] G. N. Panin // Electronics 2022. V.11. P. 619.

[3] W. Wang et al., // Sci. Rep. 2016. V.6. 31224.

[4] X. Fu et al., // Small 2019. 1903809.

[5] X. Fu et al., // Light Sci. Appl. 2023. V.12, P.39.

# СИНХРОТРОННЫЕ МЕТОДЫ В OPERANDO РЕЖИМЕ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ И ЗАРЯДОВЫХ ТРАНСФОРМАЦИЙ В МАТЕРИАЛАХ ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

О.А. Дрожжин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

Литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) на сегодняшний день являются наиболее эффективным и удобным в использовании электрохимическим источником энергии. Дальнейшее развитие этой технологии как в сторону улучшения характеристик самих ЛИА, так и в сторону альтернативных металл-ионных систем (Na-ion, K-ion, Mg-ion и т.д. – МИА), невозможно без всестороннего анализа процессов, происходящих при заряде/разряде материалов. *Operando* методы исследования являются наиболее мощным инструментом для решения этой задачи, т.к. позволяют определять основные физико-химические характеристики материалов (фазовый состав, кристаллическая структура, дефекты решетки, локальное окружение и валентное состояние атомов и т.д.) в режиме протекания электрохимической реакции – т.е. в условиях, максимально приближенных к условиям работы реального аккумулятора.

Синхротронная порошковая рентгеновская дифракция и спектроскопия рентгеновского поглощения – наиболее информативные и потому часто используемые методы анализа материалов для электрохимических устройств. В докладе будут рассмотрены возможности этих методов в применении к изучению электрохимических ячеек и их компонентов, различные виды экспериментальных установок (Рис. 1) и примеры использования.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант 17-73-30006).

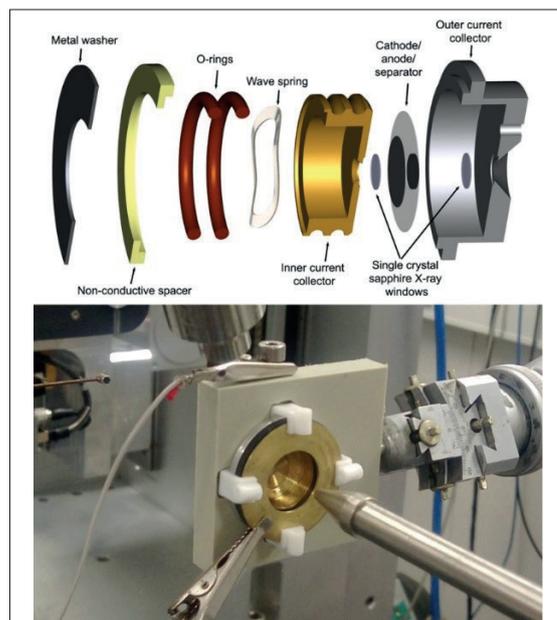


Рис. 1. Электрохимическая ячейка для проведения *operando* синхротронных экспериментов для высокомошных и высоковольтных материалов МИА<sup>[1]</sup>

[1] O.A. Drozhzhin, I.V. Tereshchenko, H. Emerich, E.V. Antipov, A.M. Abakumov & D. Chernyshov (2018). J. Synchrotron Rad. 25, <https://doi.org/10.1107/S1600577517017489>.

# ПЕРСПЕКТИВЫ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ И БИОМАТЕРИАЛОВ НА СТАНЦИИ НАНОФЭС КИСИ-КУРЧАТОВ

**В.Н. Сивков<sup>1</sup>, К.А. Бакина<sup>1</sup>, С.В. Некипелов<sup>1</sup>, О.В. Петрова<sup>1</sup>,  
Д.В. Сивков<sup>1</sup>, В.О. Рудковский<sup>1</sup>, Р.Н. Скандаков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*ФИЦ Коми НЦ УрО РАН*

В настоящее время единственным доступным российским пользователям каналом для проведения NEXAFS (Near edge X-ray absorption fine structure) исследований в ультрамягком рентгеновском (УМР) диапазоне (40–1200 эВ) является канал выхода и монохроматизации УМР излучения НаноФЭС Курчатовского источника синхротронного излучения (КИСИ-Курчатов) [1]. В связи с этим нами была предпринята попытка реализовать на канале НаноФЭС экспериментальные методики измерения сечений поглощения в области резонансного фотопоглощения вблизи краев ионизации внутренних оболочек атомов в спектральном интервале 227–454 эВ, развитые нами ранее в процессе исследований на Русско-Немецком канале (RGBL) выхода и монохроматизации синхротронного излучения (СИ) на BESSY-II.

В частности, нами были проведены исследования на канале НаноФЭС по изучению спектральных зависимостей сечений поглощения методом полного электронного выхода (total electron yield, TEY) с учетом аппаратных искажений и немонохроматического фона в области NEXAFS C1s, N1s, Ca2p и Sc2p-краев поглощения с применением абсорбционных титановых фильтров для подавления длинноволнового немонохроматического фона и излучения кратных порядков в интервале энергий квантов 450–900 эВ. Абсорбционный фильтр в виде свободной титановой пленки толщиной ~250 нм, закрепленный на металлической сетке, был установлен в камере монитора на общем держателе рядом с золотой сеткой-монитором. Исследования показали, что развитая методика может применяться не только в области 1s-края поглощения атома азота и 2p-краев поглощения атомов калия, кальция и скандия, но и в области 1s-порога ионизации углерода, несмотря на наличие значительной структуры в падающем пучке СИ.

В докладе обсуждаются как полученные результаты, так и перспективы проведения измерений сечения поглощения в более мягкой области УМР спектра 90–200 эВ, где располагаются 2p-края поглощения атомов кремния, фосфора и серы.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

[1] A.M. Lebedev, K.A. Menshikov, V.G. Nazin, et al. J. of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 15, 1039–1044 (2021).

# ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЕ РЕАКЦИИ ПЛУТОНИЯ И ЕГО АНАЛОГОВ ПРИ СОРБЦИИ НА МИНЕРАЛАХ

**А.Ю. Романчук<sup>1</sup>, А.Л. Тригуб<sup>2</sup>, С.Н. Калмыков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

Миграционное поведение радионуклидов контролируются их физико-химическими в условиях окружающей среды, где реакции с природными компонентами (неорганические минералы и природные органические вещества) имеют первостепенное значение. Плутоний является одним из основных элементов, химическое поведение которого остается плохо прогнозируемым ввиду сложностей его химических свойств. Отсутствие единой термодинамической модели, описывающей поведение плутония, ограничивает успешное прогнозирование его миграции в окружающей среде. 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 данной работы были исследованы закономерности плутония в различных степенях окисления на редокс-активных и неактивных минералах: гетите ( $\alpha$ -FeOOH), рутиле (TiO<sub>2</sub>) и бернессите (MnO<sub>2</sub>), а также его химических аналогов: церия и америция. Физико-химический формы были охарактеризованы с использованием спектроскопии рентгеновского поглощения (EXAFS, XANES).

Было установлено, что поверхность минерала инициирует протекание окислительно-восстановительных реакций, однако они могут протекать по разным маршрутам. В случае плутония в нормальных условиях на изученных минералах протекает стабилизация Pu(IV), в том числе с образованием наночастиц PuO<sub>2</sub> на поверхности. В случае сорбции Pu(VI) при окислительных значениях потенциала удалось стабилизировать шестивалентные формы плутония на поверхности гетита. Полученные данные были сопоставлены с ранее полученными сведениями и предложено их термодинамическое описание.

Для церия было показано, что бернессит инициирует процесс окисления при сорбции, что подтверждается результатами спектроскопии рентгеновского поглощения и характером сорбционного поведения. Реакция окисления церия сопровождается образованием наночастиц CeO<sub>2</sub> на поверхности твердой фазы, аналогично случаю с плутонием.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 21-73-20083.

# ФОТОКАТАЛИЗАТОРЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ CO<sub>2</sub> НА ОСНОВЕ TiO<sub>2</sub>: XAS ИССЛЕДОВАНИЕ

**А.А. Сараев<sup>1</sup>, А.Ю. Куренкова<sup>1</sup>, Е.Ю. Герасимов<sup>1</sup>, А.Л. Тригуб<sup>2</sup>, Е.А. Козлова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт катализа имени Г.К. Борескова СО РАН

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Как известно, вследствие растущего энергопотребления современного общества ведет к увеличению выбросов парниковых газов, что в конечном счете может привести к глобальным климатическим изменениям. Как известно, одним из основных компонентов парниковых газов является диоксид углерода – CO<sub>2</sub>, что ставит перед современной наукой задачу по его утилизации. Перспективным способом утилизации CO<sub>2</sub> является его фотокаталитическая конверсия в более реакционноспособные вещества, такие как СО и СН<sub>4</sub>. Эта технология позволяет снизить количество CO<sub>2</sub> в атмосфере и одновременно получать ценные органические соединения, такие как метан, метанол, этанол и формальдегид, которые затем могут быть использованы в химической промышленности или в качестве топлива. Важным преимуществом данной технологии является доступность как реагентов (CO<sub>2</sub> и вода, получаемые из атмосферы), так и источника энергии – солнечного света, однако масштабное внедрение этого процесса затруднено вследствие отсутствия эффективных фотокатализаторов. Как известно, для повышения эффективности процесса фотокатализатор подвергают различными модификациям – допирование неметаллами, термическая обработка, нанесение сокатализаторов. Последний способ увеличения эффективности фотокатализаторов является наиболее эффективным, так как нанесение металлов приводит к образованию гетеропереходов и увеличению времени жизни фотогенерированных зарядов (электрон-дырочных пар). Кроме того, в реакции фотокаталитического восстановления CO<sub>2</sub> сокатализатор позволяет увеличить селективность по отношению к определенным продуктам реакции. В случае использования сокатализаторов на основе благородных и переходных металлов последние могут образовывать различные комплексы с адсорбированными интермедиатами реакции. Ранее нами было показано, что модифицирование диоксида титана платиной и медью позволяет увеличить эффективность фотокаталитического процесса, в тоже время модифицирование медью дополнительно позволяет расширить рабочий диапазон фотокатализатора и увеличить селективность по метану [1]. Исследование фотокатализаторов до и после реакции с помощью метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) показало, что катионное распределение меди изменяется в процессе фотокаталитического восстановления CO<sub>2</sub>. Для того чтобы определить ключевые интермедиаты реакции необходимо проведение *in situ* исследований, однако метод РФЭС не позволяет проводить исследования в условиях протекания фотокаталитического процесса. Альтернативным методом, позволяющим определить катионное распределение меди в фотокатализаторе, является спектроскопия рентгеновского поглощения. Данный метод может быть адаптирован для проведения *in situ* исследований. В данной работе мы представляем прототип фотокаталитической ячейки для реализации метода спектроскопии рентгеновского поглощения в режиме *in situ*.

В качестве объектов исследования были выбраны катализаторы на основе TiO<sub>2</sub> с содержанием 1 вес.% платины и 5 вес.% меди. Показано, что под действием облучения УФ и видимым светом происходит изменение катионного распределения меди в реакционных условиях. Исследования проведены в Курчатовском центре синхротронного излучения (КИСИ, г. Москва) на станции «Структурное материаловедение».

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №21-73-10235.

[1] A.A. Saraev, A.Y. Kurenkova, E.Y. Gerasimov, E.A. Kozlova // Broadening the Action Spectrum of TiO<sub>2</sub> – Based Photocatalysts to Visible Region by Substituting Platinum with Copper, *Nanomaterials*. 2022. V. 12. №9. P. 1–15.  
DOI: 10.3390/nano12091584.

## СЕКЦИЯ 1.1

**Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области материаловедения для развития наукоемких  
производственных технологий  
[материалы и наноразмерные структуры  
для перспективных технологий и технических систем]**

Председатель: *Мухамеджанов Э.Х.*

# РАСШИРЕНИЕ МЕТОДОВ СПЕКТРОСКОПИИ И МИКРОСКОПИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ В УЛЬТРАМЯГКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОБЛАСТИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**С.Ю. Турищев<sup>1</sup>, Е.В. Паринова<sup>1</sup>, О.А. Чувенкова<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Воронежский государственный университет*

Разработки в области функциональных материалов и структур уже давно невозможно представить без высокоточной диагностики, позволяющей восстановить фундаментальные свойства изучаемой системы на атомном или субатомном уровне. Методы электронной микроскопии, такие как просвечивающая и растровая электронная микроскопия являются обязательными для диагностики материалов и структур пониженной размерности. Важными являются и методы, чувствительные к структуре вещества, такие как дифракция рентгеновских лучей или электронов.

Применение синхротронного излучения чрезвычайно высокой интенсивности, коллимированности и вариабельности длины волны в современных приложениях методов рентгеновской и электронной спектроскопии и микроскопии крайне востребовано. В самом деле, такие взаимодополняющие друг друга методы, как спектроскопия рентгеновского поглощения и фотоэлектронная спектроскопия обладают высокой чувствительностью к локальному атомному окружению, химической связи даже в случае малых количеств изучаемого материала. Это безусловно важно для понимания фундаментальных причин проявления свойств изучаемых структур, оптимизации их функционального назначения и отработке технологических аспектов формирования.

С точки зрения диапазона энергий квантов (длин волн) ультрамягкое рентгеновское излучение крайне важно для материалов, особые свойства которых продиктованы или находятся в прямой зависимости от чрезвычайно развитой поверхности - материалов нанометрового диапазона и структур на их основе. Использование синхротронного излучения в этом диапазоне привело к усовершенствованию и существенному расширению возможностей методов рентгеноэлектронной спектроскопии, в том числе в связке с методами, реализуемыми в лабораторных условиях.

Будут приведены примеры совместного использования синхротронных и лабораторных методов рентгеноэлектронной спектромикроскопии и их расширений для диагностики функциональных наноматериалов включая био-наногибридные.

Работа подготовлена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения №075-15-2021-1351.

# СИНХРОТРОННАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК $\text{YFeO}_3$

В.В. Изюров<sup>1</sup>, А.П. Носов<sup>1</sup>, И.В. Грибов<sup>1</sup>, М.А. Андреева<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН

<sup>2</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

Ортоферрит иттрия  $\text{YFeO}_3$  является одним из первых антиферромагнитных (АФМ) материалов, которые активно начали применяться в микроэлектронике [1]. Большинство исследований выполнено для объемных образцов  $\text{YFeO}_3$ , в то время как современные технологии используют тонкие пленки, но в этих объектах изменение магнитных свойств с толщиной нетривиально.

В настоящей работе исследованы магнитные свойства ультратонких монокристаллических пленок ортоферрита  $\text{Y}^{57}\text{FeO}_3$  методом мессбауэровской рефлектометрии [2]. Измерения мессбауэровских спектров проведены на синхротроне ESRF в геометрии зеркального отражения. Обработка спектров выполнялась по нашей программе REFSPEC [3]. Расщепление зеемановского секстета в спектрах при изменении температуры от 3.6 К до ~773 К последовательно уменьшалось и одновременно в них появлялся квадрупольный дублет, свидетельствующий о развитии магнитного фазового перехода. По температурным зависимостям магнитного сверхтонкого поля  $B_{\text{hf}}$  для основной орторомбической фазы  $\text{Y}^{57}\text{FeO}_3$  определены значения температуры Нееля  $T_N \cong 593$  К, 562 К и 567 К и критического параметра  $\beta \cong (0.28-0.3) \pm 0.02$  в пленках толщиной 28 нм, 6.5 нм и 4 нм соответственно. Анализ изменения соотношения интенсивностей линий в зеемановском секстете с температурой позволяет проследить за последовательным разворотом направления антиферромагнитных осей в  $\text{Y}^{57}\text{FeO}_3$  к плоскости поверхности при увеличении температуры, а также уменьшении толщины пленки. Продемонстрирована возможность селективного по глубине анализа методом мессбауэровской рефлектометрии. При сравнении спектров, измеренных при разных углах скольжения, выявлено наличие парамагнитной структуры в области интерфейса с подложкой в слое с толщиной ~1 нм.

Работа продемонстрировала уникальные возможности синхротронной мессбауэровской рефлектометрии в анализе кристаллической структуры и магнитных характеристик ультратонких пленок

[1] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, Y. Tserkovnyak, Rev. Mod. Phys. 90, 015005-1-57 (2018).

[2] В.В. Изюров, А.П. Носов, И.В. Грибов, М.А. Андреева, Физика металлов и металловедение 124(7), 566 (2023).

[3] <http://www.esrf.eu/Instrumentation/software/data-analysis/OurSoftware/REFTIM-1>.

# СТРУКТУРНАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ФЕРРОЖИДКОСТЕЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ СИ И НЕЙТРОНОВ

**М.В. Авдеев<sup>1,2</sup>, А.В. Шуленина<sup>2,3</sup>**

<sup>1</sup>*Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка,  
Объединенный институт ядерных исследований*

<sup>2</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова*

<sup>3</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

Современный интерес к магнитным коллоидным системам, таким как феррожидкости (или магнитные жидкости), обусловлен эффективной комбинацией их магнитных и немагнитных свойств, полезных в различных промышленных и биомедицинских технологиях, в частности противоопухолевой терапии. Естественным требованием для применения магнитных наночастиц является развитие синтеза химически и агрегационно-устойчивых феррожидкостей на различных жидких основах. Несмотря на определенный успех в развитии синтеза феррожидкостей, часто в них обнаруживается присутствие различных агрегатов магнитных наночастиц. В одних случаях наличие агрегатов снижает эффективность применения феррожидкостей, в других (например, гипертермия) присутствие небольших компактных агрегатов, наоборот, может повышать эффективность. Таким образом, имеется задача исследования структуры феррожидкостей в различных условиях в рамках развития методов синтеза данных систем с контролируемой агрегацией для регулирования их макроскопических свойств.

Метод малоуглового рассеяния СИ и нейтронов является прямым способом характеристики агрегации в феррожидкостях. В настоящем обзоре представлены примеры совместного использования двух видов излучения в описании морфологии агрегатов и их взаимодействия в различных типах феррожидкостей [1–4]. В экспериментах использованы возможности контрастирования различных компонент. Также отслеживается поведение и развитие агрегатов во внешнем магнитном поле.

[1] A.A. Veligzhanin, D.I. Frey, A.V. Shulenina, A.Yu. Gruzinov, Ya.V. Zubavichus, M.V. Avdeev, JMMM 459 (2018) 285–289.

[2] A.V. Nagorny, Yu.Yu. Shlapa, M.V. Avdeev, S.O. Solopan, A.G. Belous, A.V. Shulenina, O.I. Ivankov, L.A. Bulavin, JML 312 (2020) 113430.

[3] A.V. Nagorny, M.V. Avdeev, O.I. Ivankov, Y.Y. Shlapa, S.O. Solopan, T.V. Nagorna, A.V. Shulenina, Yu.L. Zabulonov, A.G. Belous, L.A. Bulavin, J. Surf. Investig.: X-ray Synchrotron Neutron Tech., 15(4) (2021), p. 781–786.

[4] O.V. Tomchuk, M.V. Avdeev, V.L. Aksenov, A.V. Shulenina, O.I. Ivankov, V. Ryukhtin, L. Vékás, L.A. Bulavin, Col. Surf. A 613, 126090 (2021).

# РАВНОВЕСНЫЕ НАНОСЛОИ В ТВЁРДЫХ РАСТВОРАХ СЛОИСТЫХ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

**А.Н. Титов<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Институт физики металлов имени М.Н. Михеева  
Уральского отделения Российской академии наук*

В материалах, состоящих из структурных фрагментов, поверхность сопряжения таких фрагментов составляет существенную, а часто и основную долю общего объёма материала. Состояние атомов на такой поверхности может отличаться от состояния в объёме. Поэтому в случае формирования твёрдых растворов замещения можно ожидать перераспределение замещающей примеси между объёмом и областью контакта структурных фрагментов, стремящееся понизить общую свободную энергию материала.

Ярким примером такого рода материалов служат слоистые дихалькогениды переходных металлов, которые можно рассматривать как последовательность структурных фрагментов X-T-X, где T – переходный металл IV, V или VI групп, а X – халькоген.

Установлено, что в ряде изученных твёрдых растворов замещения по подрешётке переходного металла формируется неравномерное распределение замещающей примеси с образованием последовательности слоёв X-T<sub>1</sub>-X и X-T<sub>2</sub>-X. Установлено, что несмотря на наличие таких неоднородностей, термодинамически, твёрдый раствор остаётся однофазным. Эффект в системах Ti<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>Se<sub>2</sub>, Ti<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>Se<sub>2</sub>, Ti<sub>1-x</sub>Zr<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> подтверждён и изучен методом фотоэмиссионной спектроскопии (SPEM) [1,2]. Предложена модель формирования такого рода слоёв и механизма их упорядочения. Предложен критерий устойчивости равномерного распределения примеси и перехода к твёрдому раствору слоёв.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБНАУКИ России (тема «Спин», №122021000036-3).

[1] A.S. Shkvarin et al. Electronic Structure of V<sub>x</sub>Ti<sub>1-x</sub>Se<sub>2</sub> Solid Solutions with the (V, Ti)Se<sub>2</sub> Structural Fragments // J. Phys. Chem. C. 2022. Vol. 126, №16. P. 7076–7085.

[2] Merentsov A.I. et al. Studying the heterogeneity of the Cr<sub>x</sub>Ti<sub>1-x</sub>Ch<sub>2</sub> (Ch = S, Se) single crystals using X-ray scanning photoemission microscopy // J. Phys. Chem. Solids. 2022. Vol. 160. P. 110309.

# РАЦИОНАЛЬНЫЙ ДИЗАЙН КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНОВ

**А.С. Овсянников<sup>1</sup>, Ю.В. Стрельникова<sup>1,2</sup>, И.Д. Шутилов<sup>1,2</sup>,  
П.В. Дороватовский<sup>3</sup>, В.А. Лазаренко<sup>3</sup>, С.Е. Соловьева<sup>1,2</sup>, И.С. Антипин<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова,  
ФИЦ Казанский научный центр РАН

<sup>2</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет

<sup>3</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

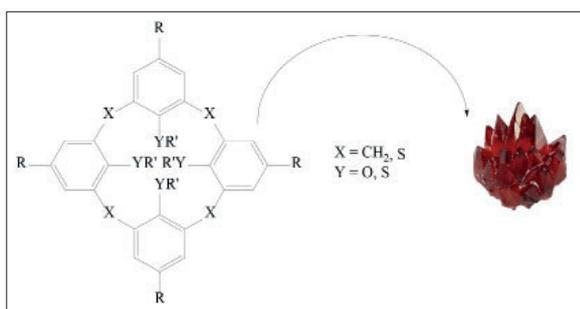


Рис.1. Схема 1

(Тиа)каликс[4]арены (Схема 1) представляют собой универсальные молекулярные строительные блоки, которые широко используются в координационной супрамолекулярной химии для получения кристаллических материалов, обладающих полезными свойствами, такими как пористость, молекулярный магнетизм, люминесценция, (фото)катализ и т.д. В данной работе представлены реализованные на практике основные подходы к рациональному дизайну супрамолекулярных координационных соединений на основе (тия)каликс[4]аренов и их функциональных производных в кристаллической

фазе, в том числе пористых и магнитоактивных материалов. Установлены основные факторы, влияющие на процесс самосборки координационных полимеров, дискретных *d-f*-металлокластеров, а также супрамолекулярных «клеток» на основе (тия)каликс[4]аренов [1]. Выявлена взаимосвязь структуры полученных координационных соединений с наблюдаемыми функциональными свойствами [2–4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект №19-73-20035).

[1] A.S. Ovsyannikov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin, S. Ferlay, *Coord. Chem. Rev.* 352, 151 (2017).

[2] A.S. Ovsyannikov, I.V. Khariushin, S.E. Solovieva, I.S. Antipin, et al., *RSC Adv.* 10, 11755 (2020).

[3] I.V. Khariushin, A.S. Ovsyannikov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin, et al, *Chem. Commun.* 58, 13628 (2022).

[4] M.V. Kniazeva, A.S. Ovsyannikov, P.V. Dorovatovskii, S.E. Solovieva, I.S. Antipin, et al, *CrystEngComm.* 24, 330 (2022).

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ В МАТРИЦАХ СО СТРУКТУРОЙ ГРАНАТА ОБЩЕГО СОСТАВА $(\text{Gd,Y})_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$

**П.В. Карцюк<sup>1</sup>, В.В. Дубов<sup>1</sup>, В.Г. Смыслова<sup>1</sup>, Д.Е. Лелекова<sup>1</sup>,  
И.Ю. Комендо<sup>1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>1</sup>, Е.В. Храмов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

Соединения со структурным типом граната, легированные различными редкоземельными элементами, могут служить основой для различных функциональных материалов. В частности, при легировании таких соединений атомами Се, Тб и Еу получают материалы с люминесцентными и сцинтилляционными свойствами [1, 2]. Особый интерес представляют соединения общего состава  $(\text{Gd, Y, RE})_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$  ( $\text{RE} = \text{Ce, Tb, Eu}$ ) ввиду их высокой плотности, высокой радиационной стойкости и яркости высвечивания люминесценции и сцинтилляции [3].

В данной работе были получены керамические образцы соединения  $(\text{Gd,Y})_{3-x}\text{Ce}_x\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$  (GYAGG:Ce) с различным содержанием атома-активатора ( $x = 0,005 - 0,03$ ), а также образцы с таким же составом матрицы, но допированные Тб и Еу (в обоих случаях количество атомов активатора составляло 0,1 формульную единицу). Для данных образцов были проведены исследования методом XANES, в результате которых были установлены степени окисления атомов Се и Еу: основой для этих ионов является степень окисления  $3^+$ , однако, с повышением концентрации Се характер спектра поглощения свидетельствовал о наличии ионов  $\text{Ce}^{4+}$ . Помимо этого методом EXAFS была исследована серия образцов GYAGG:Ce, дополнительно легированная Zr, используемым в качестве спекающей добавки. В результате было показано, что Zr в этом соединении находится в более высоком координационном окружении, чем в эталонном препарате  $\text{ZrO}_2$ . Также для образцов с различным содержанием Се был проведён анализ методом рентгеновской дифракции с использованием СИ и было показано, что с увеличением концентрации легирующего атома растёт параметр решётки матрицы GYAGG (с 12,2228 до 12,2280 Å).

[1] R. Lisiecki, P. Solarz, et al., Spectroscopic peculiarities of excitation and emission processes as well as relaxation dynamic of excited states in doubly and triply-doped  $\text{Gd}_3\text{Ga}_3\text{Al}_2\text{O}_{12}:\text{Ln}^{3+}$  ( $\text{Ln}^{3+} = \text{Eu}^{3+}, \text{Tb}^{3+}, \text{Ce}^{3+}$ ) crystals. Opt. Mater. 88, p. 492–499 (2019).

[2] N.J. Cherepy, J.D. Kuntz, Seeley Z.M., et al., Transparent ceramic scintillators for spectroscopy and radiography. in Proc. SPIE. 7805 (2010).

[3] P. Lecoq, A. Gektin, M. Korzhik, Inorganic Scintillators for Detector Systems. Particle Acceleration and Detection. Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 408, ISBN 978-3-319-45521-1 (2017).

# ЛЁГКИЕ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ НЕЙТРОНОВ И ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

**И.Ю. Комендо<sup>1</sup>, М.В. Коржик<sup>1,2</sup>, Д.Е. Лелекова<sup>1</sup>, А.А. Фёдоров<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Институт ядерных проблем БГУ

В настоящей работе рассмотрены сцинтилляционные материалы, сочетающие в себе свойства: малый эффективный заряд, высокая концентрация лития, возможность локализации редкоземельных ионов-активаторов в кристаллической матрице. Эти свойства потенциально позволяют материалу детектировать нейтроны в широком диапазоне энергий.

Ранее нами были описаны сцинтилляционные свойства соединения  $\text{Li}_2\text{CaSiO}_4$  [1], которое сочетает указанные выше свойства. Ион-активатор –  $\text{Eu}^{2+}$  позволяет добиться сочетания световыхода (LY) и кинетики сцинтилляций ( $\text{LY} \sim 100\,000$  фотон/нейтрон,  $\tau \sim 150$  нс в матрице  $\text{Li}_2\text{CaSiO}_4$ ), которое делает это соединение многообещающей альтернативой широко распространённой смеси  $\text{LiF}$  и  $\text{ZnS}$  для регистрации нейтронов. Помимо  $\text{Li}_2\text{CaSiO}_4$  рассмотрены другие кристаллические матрицы, подходящие для локализации  $\text{Eu}^{2+}$ . Известно, в  $\text{Eu}^{2+}$ -допированных соединениях часто ионы  $\text{Eu}^{2+}$  и  $\text{Eu}^{3+}$  присутствуют одновременно, при этом трёхвалентный европий тушит люминесценцию двухвалентного из-за безызлучательных переходов  $4f^65d(E_g) \rightarrow {}^8S_{7/2}$  иона  $\text{Eu}^{2+}$  с резонансным, либо реабсорбционным переносом энергии к иону  $\text{Eu}^{3+}$ . Для повышения световыхода необходимо стабилизировать ионы европия в двухвалентном состоянии. Нами предложены технологические способы такой стабилизации. Люминесцентные измерения доказали применимость выбранных подходов, которые заключаются в неизовалентном замещении ионов в катионной и анионной подрешётках [2] за счёт содопирования. Однако, для существенного повышения световыхода сцинтилляций, необходим точный подбор концентраций содопирующих элементов – содопанты стабилизируют ион  $\text{Eu}^{2+}$ , но создают дефекты в структуре, на которых рассеиваются носители заряда.

Для сравнения материалов для регистрации вторичных частиц было проведено сравнение энергетической зависимости средней линейной плотности неравновесных носителей заряда. Рассмотрены особенности образования термализованных пар в различных типах соединений.

[1] I. Komendo, A. Bondarev, A. Fedorov et. al. M. New Scintillator  ${}^6\text{Li}_2\text{CaSiO}_4:\text{Eu}^{2+}$  for Neutron Sensitive Screens. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 1045, 167637 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.nima.2022.167637>.

[2] V. Retivov, V. Dubov, I. Komendo et. al. Compositionally Disordered Crystalline Compounds for Next Generation of Radiation Detectors. Nanomaterials. 12, 23, 4295 (2022). <https://doi.org/10.3390/nano12234295>.

# СЛОИСТЫЕ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЮЩИЕ МАТЕРИАЛЫ – ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПОСТ ОБРАБОТКИ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

**О.В. Бойцова<sup>1</sup>, А.А. Садовников<sup>3,4</sup>**

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>3</sup>ИОНХ РАН

<sup>4</sup>ИНХС РАН

Тренд сборки сложных микрообъектов из наночастиц несферической формы подхвачен в настоящее время самыми передовыми научными коллективами мира, создающими последнее поколение материалов для медицинских, биологических и фотовольтаических применений. Уникальная возможность удерживать метастабильные состояния поверхности для несферических наночастиц, собирать их в упорядоченные кристаллы или тонкие покрытия, допировать для усиления физических свойств получаемых материалов позволило некоторым научным коллективам мира сделать колоссальные шаги, приблизившие фундаментальные исследования к реальным устройствам. *In-situ* методы изучения кинетики процессов структурообразования сложных композитных объектов до сих пор требуют огромных затрат времени, и часто привлечения методов тяжёлой артиллерии, например, рентгеновских техник с участием синхротронного излучения для изучения процессов формирования и роста многоуровневых или высокоориентированных субструктур.

В докладе будут представлены существующие неорганические мезокристаллы, включая примеры новых подклассов мезокристаллов, и способы их получения. Также будет уделено внимание результатам исследования изменения структуры, микроструктуры, фазового и химического составов в процессе термической обработки порошков оксофлюоротитната аммония, полученных в матрицах различных полимеров, от комнатной температуры до 600°C методами спектроскопии комбинационного рассеяния, масс-спектрометрии, а также рентгеновской дифракции в различных геометриях в том числе с применением синхротронного излучения [1]. На примере мезокристаллов диоксида титана будет продемонстрированы способы усиления фотоактивных свойств материала [2, 3].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №22-29-00963.

[1] A.A. Sadovnikov, A.V. Garshev, A.A. Eliseev et al, *Catalysis Today*, 2021, 378, P.133-139

[1] O.V. Boytsova, O.A. Drozhzhin, D.I. Petukhov et al, *Nanotechnology*, 2022, 33, P. 055603.

[1] Boytsova, O.; Zhukova, I.; Tatarenko, A.; Shatalova, T.; Beiltiukov, A.; Eliseev, A.; Sadovnikov, *Nanomaterials*, 2022, 12, 4418.

# К ВОПРОСУ О КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЕ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ, СИНТЕЗИРОВАННОЙ В ТЯЖЁЛОЙ ВОДЕ

Г.П. Копица<sup>1</sup>, Р.Ю. Смыслов<sup>1,2</sup>, А.А. Кульминская<sup>1</sup>, Е.В. Журишкина<sup>1</sup>, Н.В. Цвигун<sup>3</sup>,  
А.Е. Соколов<sup>1</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>4</sup>, А.К. Хрипунов<sup>2</sup>, А.Е. Баранчиков<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова  
НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Институт высокомолекулярных соединений РАН

<sup>3</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>4</sup>Лаборатория Нейтронной Физики имени И.М. Франка,  
Объединенный Институт Ядерных Исследований

<sup>5</sup>Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН

Биосинтез и формирование надмолекулярной структуры (НМС) бактериальной целлюлозы (БЦ) происходят в водной среде. НМС возникает в результате самосборки макромолекул целлюлозы за счет сетки водородных связей с участием гидроксильных групп в первичных спиртовых группах целлюлозных цепей, собирающихся в микрофибриллы. Из последних образуются наноленты БЦ. Получение информации о путях самосборки полимерных цепей в наноленты, а также формировании кристаллической и аморфной фаз БЦ возможно через исследование доступности гидроксильных групп водородному обмену с молекулами воды.

В настоящей работе кристаллическая и надмолекулярная структура бактериальной целлюлозы, полученной биосинтезом в  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{D}_2\text{O}$  с помощью штамма *Gluconoacetobacter hansenii* (ATCC 1082), исследована методами ИК-спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света, рентгеновской и нейтронной дифракции, СЭМ, низкотемпературной адсорбции азота, а также малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей.

Комплексный анализ полученных данных показал, что надмолекулярная структура БЦ, синтезированной в тяжелой воде, существенно отличается от той, которая получается в обычной воде. Обнаружена не только замена связей О-Н на О-D, но и появление связей С-D. Установлено, что, при сохранении триклинной сингонии (пространственная группа  $P1$ ), замена среды синтеза приводит к заметному уменьшению (2%) параметров  $b$  и  $c$  кристаллической решетки БЦ. Также выявлено, что замена  $\text{H}_2\text{O}$  на  $\text{D}_2\text{O}$  приводит не только к существенным изменениям характерных размеров нанолент БЦ, но и влияет на пространственную организацию полимерной сети в целом.

## СЕКЦИЯ 1.1

**Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области материаловедения для развития наукоемких  
производственных технологий  
[метрологический контроль и сертификация]**

Председатель: *Мухамеджанов Э.Х*

# IN SITU ДИАГНОСТИКА НАНОРАЗМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА СТАНЦИИ СТРУКТУРНОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ КУРЧАТОВСКОГО СИНХРОТРОНА

**М.А. Солдатов<sup>1</sup>, И.Е. Горбань<sup>1</sup>, В.А. Ролдугин<sup>1</sup>, М.А. Грицай<sup>1</sup>, П.В. Медведев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов ЮФУ

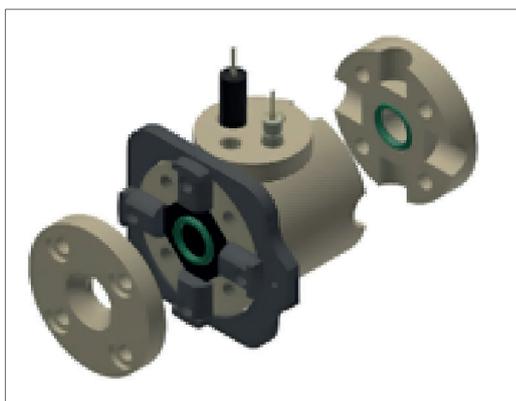


Рис.1. Слева – ячейка для исследования фотоэлектрохимических процессов

Наноразмерные материалы находят свое применение в энергетике [1] в качестве катализаторов, в медицине [2–4] для терапии и адресной доставки лекарственных препаратов, газовой сенсорике и многих других важных областях современных технологий. Понимание взаимосвязи структуры и свойств материалов позволяет создавать более эффективные катализаторы или более чувствительные газовые сенсоры. Исследования структуры материалов во время прохождения физико-химических процессов позволяет заглядывать в детали механизмов реакций и управлять такими свойствами как эффективность, стабильность и селективность катализатора или газового сенсора.

Для проведения таких экспериментов на станции структурного материаловедения Курчатовского синхротронного центра были разработаны экспериментальные ячейки, которые позволяют проводить измерения спектров рентгеновского поглощения как *in situ*, так и *operando*. в ходе процессов. В частности, была разработана ячейка для проведения фото-электрохимических реакций (Рисунок 1). Данная ячейка – гибрид трехэлектродной электрохимической ячейки и ячейки для синхротронных измерений. Данная ячейка позволяет измерять спектры рентгеновского поглощения подавая разность потенциалов на электроды и освещая катализатор фотонами оптического диапазона.

Вторая *operando* ячейка разработана для тестирования газочувствительных устройств. В данной ячейке можно нагревать газовый сенсор до температур порядка 200°C, подавать газы и измерять ёмкостные и резистивный характеристики.

[1] H. Su, M.A. Soldatov, et al., eScience, 102–109, 2 (2022).

[2] V.V. Butova, M.A. Soldatov, et al., Russian Chemical Reviews. 280, 85 (2016).

[3] M.A. Soldatov, A. Martini, et al., Polyhedron, 232–253, 155 (2018).

[4] M.A. Soldatov, J. Göttlicher, et al., The Journal of Physical Chemistry C, 122(15), 8543–8552 (2018).

# НОВЫЕ АЛГОРИТМЫ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ НА ОСНОВЕ СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Б.А. Бакиров<sup>1</sup>, С.Е. Кичанов<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований*

Метод компьютерной томографии с использованием различных типов излучения (рентгеновские лучи, нейтроны, электромагнитное поле и т.д.) получил широчайшее распространение и продолжает набирать популярность в таких смежных с физикой областях как медицина, материаловедение, геология, археология и многие другие. Особое место в современном материаловедении занимает нейтронная томография. Природа взаимодействия нейтронов с веществом определяет существенные преимущества данного метода: большая глубина проникновения, чувствительность к легким элементам, хороший контраст для элементов с близкими атомными номерами.

Однако, метод нейтронной томографии имеет ряд нерешенных проблем: большая длительность эксперимента, низкое качество изображений, вычислительная ресурсоемкость. Таким образом развитие метода нейтронной томографии требует применения новых математических алгоритмов обработки и реконструкции данных. Наиболее перспективными в данной области являются алгоритмы основанные на сверточных нейронных сетях и глубоком обучении.

В данной работе была реализована наиболее оптимальная архитектура сверточной нейтронной сети для предварительной обработки и томографической реконструкции нейтронных радиографических данных. Обучение нейронной сети проводилось с помощью набора данных, полученных на станциях нейтронной томографии в Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка и НИЦ «Курчатовский институт». Результатом стала программа, эффективность работы которой сравнивалась с существующими методами обработки данных.

Работа выполнялась при финансовой поддержке гранта ОМУС №23-402-02.

# КОРРЕКТИРОВКА ОШИБОК В НАНО-МЕТРОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ НА ПРИМЕРЕ МЕТОДА СТОЯЧИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН

**К.В. Николаев<sup>1</sup>, А.И. Сафонов<sup>1</sup>, О.А. Кондратьев<sup>1</sup>, Г.В. Пруцков<sup>1</sup>,  
И.А. Субботин<sup>1</sup>, С.Н. Якунин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

За последние пять лет микроэлектронная промышленность испытала качественный переход на новый уровень. Это связано с появлением ультрафиолетовой литографии, которая начиная с 2019-го года используется для производства потребительской электроники. Новая технология позволила уменьшить разрешающую способность литографии, однако это, в свою очередь, вызвало новую проблему. Разрешающая способность производства чипов превышает разрешающую способность доступных метрологических подходов. Это обуславливает потребность в развитии новых нанометрологических подходов, в том числе и, с использованием синхротронов.

Один из таких подходов – это метод стоячих рентгеновских волн (СРВ). Он позволяет исследовать пространственную структуру наноустройств, причём для каждого химического элемента отдельно. Стандартная реализация СРВ, подразумевает детектирование флуоресценции в нормальных углах выхода, при возбуждении излучением падающим под скользящими углами. Более экзотичная реализация метода основана на обратном процессе – эффект Косселя, который наблюдается при нормальном возбуждении и детектировании в скользящей геометрии. Недавно, возможность проведения измерений на основе эффекта Косселя была реализована на станции «Микрофокус» Курчатовского источника синхротронного излучения. Геометрия эксперимента позволяет проводить локальный анализ структуры, за счёт малой площади засветки, в сравнении с СРВ, в котором засвечивается вся поверхность образца. Однако, за возможность локального анализа приходится расплачиваться интенсивностью полезного сигнала, что затрудняет обработку данных.

Нанометрология подразумевает не просто восстановление параметров исследуемой структуры, но и точный анализ ошибок восстановления. Мы исследовали одну тестовую структуру и методом СРВ, и методом основанным на эффекте Косселя. Для исследования мы применили современные методы анализа данных: моделирование ошибок, Байесовский вывод, максимизация правдоподобия и Монте-Карло цепи Маркова. Это позволило нам компенсировать потерю точности, связанную с меньшей интенсивностью полезного сигнала в эффекте Косселя по сравнению с СРВ. При этом мы добились статистической достоверности восстановления сравнимой с методом СРВ, сохраняя локальный характер исследования.

# СИНХРОТРОННАЯ ВРЕМЯРАЗРЕШАЮЩАЯ МЕТОДИКА РЕГИСТРАЦИИ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ, И ЕЕ РЕАЛИЗАЦИЯ ДЛЯ НАБЛЮДЕНИЯ ПЬЕЗОФОТОВОЛЬТАИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В НИОБАТЕ ЛИТИЯ

**Е.И. Мареев<sup>1</sup>, А.Г. Куликов<sup>1,2</sup>, Ф.С. Пиляк<sup>1,2</sup>, А.Е. Благов<sup>1,2</sup>, Н.В. Марченков<sup>1,2</sup>, Ю.В. Писаревский<sup>1,2</sup>, Ф.В. Потёмкин<sup>3</sup>, М.В. Ковальчук<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

На экспериментальной станции РКФМ КИСИ-Курчатов разработана и апробирована рентгено-дифракционная методика изучения динамики деформаций, индуцированных наносекундными лазерными импульсами. Данная методика, обладающая суб-нс временным разрешением, является вариацией времяразрешающей дифрактометрии исследования электроиндуцированных процессов, реализованной ранее на лабораторном [1] и синхротронном источнике излучения [2, 3].

Особенностью реализованной методики стало использование лазера с относительно низкой частотой повторения лазерных импульсов 5 Гц. В сочетании с регулируемой мощностью и фокусировкой это позволило избежать влияния нагрева образца лазером. Реконфигурируемая программная платформа с использованием ПЛИС обеспечивала «жёсткую» синхронизацию наносекундного лазера (4 нс, энергия до 20 мДж,  $\lambda = 532$  нм) с электронными банчами источника СИ. Это позволило регистрировать временную динамику кривых дифракционного отражения (КДО).

Разработанная методика была использована для изучения динамики индуцированных лазером пьезоэлектрических деформаций в кристаллах  $\text{LiNbO}_3$  номинально чистых, а также легированных Fe. Впервые зарегистрирована динамика формирования указанного эффекта. Деформация возникает спустя 5 нс после окончания действия импульса лазера затем резко возрастает и спустя 30 нс кристалл возвращается в исходное состояние. В этом временном диапазоне наблюдается также существенное уменьшение интегральной интенсивности. Наиболее отчетливо эффект проявляется на легированном образце. При этом деформация локализована только в области кристалла, засвечиваемой лазерным пучком. Полученные результаты позволили впервые получить важнейшую информацию о процессе формирования пьезофотовольтаических деформаций.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №23-73-00039

[1] N.V. Marchenkov, et al. Review of Scientific Instruments 89, 095105 (2018).

[2] М.В. Ковальчук и др., Кристаллография 67, 5, 771–784 (2022).

[3] F.V. Potemkin, et.al. Review of Scientific Instruments, 92, 053101 (2021).

## СЕКЦИЯ 1.2

**Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области живых систем, органических и гибридных материалов**

Председатели: *Новикова Н.Н., Петухов М.В.*

# СОВМЕШНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ, МУРН И МУРР

А.И. Титов<sup>1</sup>, Д.В. Лебедев<sup>1,2</sup>, А.В. Швецов<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>*Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова  
НИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>2</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>3</sup>*Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого*

Методы МУРН и МУРР широко используются для изучения различных типов биологических систем. Однако в общем случае методы малоуглового рассеяния дают лишь ограниченное представление о структуре биомакромолекулярных комплексов в растворе. В этом случае малоугловое рассеяние можно использовать в сочетании с другими методами, такими как молекулярное моделирование и молекулярная динамика с учётом влияния растворителя, что в ряде случаев может позволить построить подробные полноатомные модели исследуемого биомакромолекулярного комплекса в растворе.

Использование методов МУРР, МУРН и молекулярной динамики требует прямого сравнения данных получаемых методами малоуглового рассеяния и данных молекулярной динамики. При этом важным фактором остается правильный учет вклада растворителя. Мы использовали разработанный нами метод расчета кривых МУРН [1] для ряда многокомпонентных биологических систем, таких как комплексы RecA::ssDNA, RecA::RecX::ssDNA [2], различные комплексы РНП вируса гриппа А [3], лактоферрин и другие биомакромолекулярные системы. В ряде случаев использование такого комбинированного подхода позволяет даже найти новые комплексы в растворе или пролить свет на некоторые интересные эффекты с наблюдаемыми по данным МУРН параметрами.

[1] A.V. Shvetsov et.al. doi:10.1134/S1027451013060372.

[2] A.V. Shvetsov et.al. doi:10.1016/j.febslet.2014.01.053.

# СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ БЕТА-ГАЛАКТОЗИДАЗЫ *DESULFUROCOCCUS AMYLOLITICUS*

**В.Р. Самыгина<sup>1,2</sup>, Е.Б. Пичкур<sup>1</sup>, Ю.В. Киль<sup>3</sup>, В.Р. Сергеев<sup>3,4</sup>, Г.Н. Рычков<sup>3,4</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника»

<sup>3</sup>Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>4</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Бета-галактозидаза *Desulfurococcus amyloleticus* (DaβGal) – фермент, способный отщеплять β-D-галактопиранозид от ди- и олигосахаридов, включая лактозу. Фермент интересен для биотехнологий, так как является термостабильным и может быть использован в производстве безлактозных продуктов. Получение трехмерной структуры DaβGal и ее комплексов с субстратами важно для выявления особенностей функционирования фермента.

Структура DaβGal была получена методом криоЭМ при разрешении 3,2Å (Titan Krios, РЦ «Нано-зонд» НИЦ КИ, Россия). Этим же методом была реконструирована трехмерная структура (с разрешением 2,84Å) с использованием образца DaβGal с β-D-галактопиранозой. Однако, в активном центре не было обнаружено электронной плотности соответствующей лиганду. Для дальнейших структурных исследований использовался метод рентгеноструктурного анализа (РСА). Кристаллы DaβGal размером до 0,1 мм, полученные методом диффузии в парах, были неоднородны по дифракционному качеству и рассеивали от 4,0 до ~2,2Å. Набор дифракционных данных, позволивший решить структуру с разрешением 2,15Å, получен с использованием синхротронного излучения (ESRF, Гренобль, Франция). Анализ структуры показал, что фермент является димером и позволил установить детали строения активного центра. Сравнение структур полученных разными методами продемонстрировало идентичность укладки полипептидной цепи и межсубъединичного интерфейса димера. Одна из субъединиц в кристаллической структуре определена полностью, тогда как в криоЭМ структуре в обеих субъединицах отсутствует электронная плотность для а.а. 739–746. Структура комплекса с β-D-галактопиранозой с четырьмя димерами в независимой части кристаллической ячейки была получена с разрешением 3,2 Å. В структуре комплекса в четырех субъединицах визуализируется электронная плотность для лиганда. Полученные в работе структурные данные могут быть использованы для рационального дизайна DaβGal.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда №19-74-20146 (выделение, очистка белка и криоЭМ) и в рамках тематического плана НИЦ «Курчатовский Институт» (РСА).

# ИННОВАЦИОННЫЕ БИОКОМПЗИТЫ ДЛЯ РЕГЕНЕРАТИВНОЙ МЕДИЦИНЫ

Ю.Е. Горшков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований

Регенеративная медицина – одно из приоритетных направлений современной науки. Быстрое развитие этой области связано, в том числе, и с созданием новых инновационных композитных биоматериалов для трансплантологии, тканевой инженерии, регенеративной фармакологии.

В докладе будут представлены возможности малоуглового нейтронного и рентгеновского рассеяния (МУР) для решения современных проблем регенеративной фармакологии. В частности, будут рассмотрены результаты исследования биогибридных наноконплексов на основе природных компонент (фитогенерированных Ag/AgCl наночастиц, биоподобных мембран и хитозана), продемонстрировавших высокую эффективность в борьбе с устойчивыми микроорганизмами (*Staphylococcus aureus* и *Escherichia coli*) и высокий потенциал в борьбе с раковыми клетками HT-29 и HepG2 [1, 2]. Также будет продемонстрирован возможный механизм проникновения синтезированного в НИИ гриппа им. А.А. Смородинцева пептида РВ<sub>16-14</sub> соответствующего участкам аминокислотной последовательности белка РВ1 вируса гриппа А, через модельную мембрану клетки [3]. Данное исследование нацелено на разработку инновационного препарата, способного блокировать репликацию вируса.

Создание инновационных биоконплексов для тканевой инженерии и трансплантологии многократно возросло в последние десятилетия. Выявление высокопотенциальных материалов с требуемыми физико-химическими или механическими свойствами возможно уже на этапе структурных исследований методами МУРН и МУРР, что значительно сокращает время и затраты на проведение экспериментов *in vitro* и *in vivo*. Так, в работе [4] продемонстрирована эффективность МУРН в разработке покрывных материалов из бактериальной целлюлозы (БЦ) при лечении ожогов. Ведение в матрицу БЦ биоцидов (ионы меди) позволяет получать биоматериалы с противомикробными свойствами [5]. Кроме того, МУРР может успешно использоваться в качестве аттестационного метода в трансплантологии, как это показано на примере исследования кератопротезов из свиной роговицы глаза, разработанных в офтальмологическом центре Восток-прозрение [6].

[1] М.-Е. Barbinta-Patrascu, Y. Gorshkova, et al., *Materials*. 14, 4726 (2021).

[2] Y. Gorshkova, М.-Е. Barbinta-Patrascu, et al., *Nanomaterials*. 11, 1811 (2021).

[3] Y. Zabrodskaya, Y. Gorshkova, et al., *Crystallography Reports*. 66, 1013 (2021).

[4] L.A. Ivanova, K.B. Ustinovich, et al., *Materials*. 13, 2087 (2020).

[5] R.Yu. Smyslov, G.P. Kopitsa, et al., *Smart Materials in Medicine*. 3, 274 (2022).

[6] С.И. Анисимов, И.А. Попов, и др., *The EYE ГЛАЗ*. в печати (2023).

# СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ВИРИОНОВ РЯДА РАСТИТЕЛЬНЫХ ВИРУСОВ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

**М.В. Петухов<sup>1</sup>, А.Л. Ксенофонтов<sup>2</sup>, Э.В. Штыкова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>2</sup>НИИ физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского МГУ имени М.В. Ломоносова

Растительные вирусы представляют собой экономически важную группу патогенов, приносящих значительный урон сельскому хозяйству. Поэтому изучение их структуры и свойств является приоритетной научной задачей. В данной работе структурный анализ вирионов и реполимеров белка оболочки вируса табачной мозаики (ВТМ) [1], интактного и деградированного А-вируса картофеля (АВК и АВК-ΔN) [2], интактного Х-вируса картофеля (ХВК) и вируса мозаики альтернантеры (ВМА) [3] был проведен с использованием синхротронного малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и комплементарных методов.

Несмотря на принадлежность к разным семействам, эти вирусы характеризуются схожим строением. Все они состоят из идентичных субъединиц белков оболочки (БО), расположенных спирально вокруг одноцепочечной РНК. В структурном анализе вирионов разных семейств применялись различные приемы и подходы к интерпретации данных МУРР, а также использовались структуры отдельных элементов вирусов, полученные с помощью рентгеновской кристаллографии и электронной микроскопии.

В результате проведенных исследований методом малоуглового рентгеновского рассеяния впервые были получены пространственные характеристики низкого разрешения ряда растительных вирусов в растворе, то есть в условиях, близких к естественным. Профили МУРР выявили ряд особенностей строения вирусных частицы: форму, диаметр, шаг спирали и периодичность структур вирионов и реполимеров. Особое внимание было уделено структурному исследованию неупорядоченных N-концевых областей оболочечных белков А- и Х-вирусов картофеля. Было показано, что эти области играют важную роль в формировании спиральной структуры вирионов. Кроме того, удаление или изменение состава N-концевого пептида влияло на его активность в качестве трансляционного репрессора. В целом, проведенный структурный анализ свидетельствует о значении N-концевых доменов белка оболочки для выполнения жизненно важных функций различных вирусов картофеля, что следует учитывать для выработки стратегии по борьбе с этими растительными патогенами.

[1] А.Л. Ксенофонтов, М.В. Петухов, и др., Биохимия. 85, 360 (2020).

[2] Э.В. Штыкова, М.В. Петухов, и др., Биохимия. 86, 274 (2021).

[3] А.Л. Ксенофонтов, М.В. Петухов, и др., Биохимия. 88, 68 (2023).

# АНАЛИЗ ДАННЫХ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА КОМПЛЕКСОВ ЭУКАРИОТИЧЕСКОЙ РИБОСОМЫ С НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫМИ ИНГИБИТОРАМИ, ИНДУЦИРУЮЩИМИ ПРОЧТЕНИЕ СТОП-КОДОНОВ

**К.С. Усачев<sup>1,2</sup>, Ю.О. Згадзай<sup>3</sup>, О.А. Колосова<sup>3</sup>, М.М. Юсупов<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»

<sup>2</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет

<sup>3</sup>Институт генетики, молекулярной и клеточной биологии (IGBMC)

Генетические заболевания, ассоциированные с нонсенс-мутациями (возникновение стоп-кодона в середине гена жизненно важного белка) настолько разнообразны, что на сегодняшний день отсутствует единый протокол лечения данного класса заболеваний [1]. Биосинтез белка осуществляется рибосомами – крупными (>2 мДа) макромолекулярными РНК-белковыми комплексами, обеспечивающими перевод генетической информации, закодированной в молекулах матричных РНК в молекулы белка [2]. Возникновение нонсенс-мутации в середине последовательности гена белка приводит к остановке работы рибосомы и синтезу укороченного нефункционального варианта белка. Нонсенс-мутации могут вызывать различные патологии, такие как редкие генетические заболевания, рак, метаболические и неврологические нарушения [3, 4]. Одной из стратегий лечения данных заболеваний является применение малых молекул, (таких как аминокликозиды), заставляющих рибосому совершать «ошибки» при прочтении кодонов. Однако, терапевтический эффект достигается только при высоких концентрациях данных соединений, что приводит к ряду тяжелых побочных эффектов. Одним из направлений решения данной проблемы является поиск модификаций известных аминокликозидов для получения более эффективных и менее токсичных аналогов. В связи с этим аминокликозиды, особенно в сочетании с индукторами прочитывания стоп-кодонов, в настоящее время представляют большой интерес для разработки на их основе новых препаратов.

В рамках нашей работы с помощью рассеяния синхротронного излучения на монокристаллах эукариотических рибосом в комплексе с низкомолекулярными ингибиторами были получены структурные данные, на основе которых найдены общие закономерности в механизме действия аминокликозидов и ингибиторов усиливающих прочтение стоп-кодонов.

[1] J. R. Wangen, R. Green, *Elife*. 9, e52611 (2020).

[2] Y. Zgadzay et al., *Sci Adv*. 8, eabn1062 (2022).

[3] M. Mort et al., *Hum Mutat*. 29, 1037 (2008).

[4] R. Bordeira-Carrico et al., *Trends Mol Med*. 18, 667 (2023).

# ТЕХНОЛОГИИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ АНАЛИЗА ДИФРАКЦИОННЫХ ПАТТЕРНОВ БИОПОЛИМЕРОВ И ИХ КОМПЛЕКСОВ

К.В. Шайтан<sup>1</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

Развитие технологий искусственного интеллекта открывает новые возможности, в частности, для решения задач структурной биологии. Применяются алгоритмы машинного обучения, распознавания изображений, анализа больших данных и др. Это находит применение и для анализа изображений [1], получаемых от биообъектов методами оптической, крио-электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа, а также для относительно новых и в перспективе много обещающих методов предсказания пространственной структуры белков по аминокислотной последовательности. Мы полагаем, что сочетание этих методов ИИ с возможностями новейших сверх ярких источников рентгеновского излучения способно в будущем расширить возможности структурной биологии, например, в направлении более детального определения пространственной структуры неупорядоченных или частично упорядоченных биообъектов, которые в настоящее время обычно изучаются методами малоуглового рассеяния РИ.

В докладе обсуждаются результаты численных экспериментов по дифракции интенсивного РИ и оцениваются условия для получения более детальной информации о пространственной структуре слабо упорядоченных биомолекулярных объектов. При этом фокус внимания сдвинут в сторону разработки и моделирования перспективных экспериментальных платформ для формирования надмолекулярных конструкций, включающих некристаллизующиеся белки. В качестве таких платформ предлагаются несколько типов белок-мембранных комплексов на основе липосом и липодисков, а также подложки на основе графена. Методами численного эксперимента изучается влияние структуры биомолекулярного комплекса и условий эксперимента на эффективность распознавания методами ИИ пространственной структуры белка в различных функциональных состояниях по набору картин дифракции.

Сочетание методов анализа больших данных (БД) с использованием обучающих баз данных по дифракции уже известных и предсказанных методами ИИ структур белков в различных функциональных состояниях дает в перспективе весьма полезный инструмент для интегративной структурной биологии.

[1] Г.А.Армеев, М.П.Кирпичников и др. Интеллектуальные системы. Теория и приложения. Т. 26, вып. 1, с. 23–33 (2022).

# СТРУКТУРА ГЕНОМ-ЗАЩИТНЫХ БИОКРИСТАЛЛОВ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ И КРИО-ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Л.А. Дадина<sup>1</sup>, Р.А. Камышинский<sup>1,2</sup>, Ю.М. Чесноков<sup>1,2</sup>, А.А. Можжев<sup>1,3</sup>,  
А.М. Гордиенко<sup>1</sup>, М.В. Петухов<sup>1</sup>, Э.В. Штыкова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>ИБХ РАН

Резкий рост внутриклеточного синтеза специфического белка Dps, который связывает ДНК для защиты генома от вредных факторов, приводит к кристаллизации в клетке — одному из самых любопытных процессов в области наук о жизни на данный момент. Несмотря на многочисленные исследования этого механизма молекулярные, биохимические и структурные аспекты стратегии защиты бактерий от неблагоприятных условий до сих пор недостаточно изучены.

Проведенная серия комплексных исследований *in vitro* структуры Dps-ДНК кристаллов показала, что при определенных условиях эти кристаллы могут образовывать триклинную [1] и кубическую структуры [2]. Впервые удалось определить в кристаллах взаимное расположение Dps и ДНК. Показано, что добавление катионов Fe<sup>2+</sup> и Mg<sup>2+</sup> приводит к разрушению биокристаллов, но результаты их действия различны [3]. Подробно исследован процесс накопления железа в полости белка Dps [4]. Показано, что от наличия или отсутствия в растворе хелатирующего агента ЭДТА зависит конформация N-концевых фрагментов Dps, которые ответственны за взаимодействие с ДНК [5]. Использование геномной ДНК позволило наблюдать различную морфологию комплексов Dps-ДНК при варьировании параметров буфера. В частности, полученные цилиндрические структуры напоминают гипотетическую модель внутриклеточной сборки ДНК–Dps [6].

Комплементарность методов МУРР и крио-ЭМ позволила впервые на новом уровне исследовать структурные особенности процессов биокристаллизации Dps-ДНК и определить факторы, которые влияют на этот процесс. В целом, полученные результаты представляют собой шаг вперед в понимании действия защитного механизма клетки.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №18-74-10071).

[1] L.A. Dadinova, Yu.M Chesnokov., R.A. Kamyshinsky, et al. FEBS Letters. 593 (2019).

[2] R. Kamyshinsky, Yu. Chesnokov, L. Dadinova, et al. Biomolecules, 1, 10 (2020).

[3] L. Dadinova, R. Kamyshinsky, Y. Chesnokov, et al. Int. J. Mol. Sci. 22, 6056 (2021).

[4] E.V. Dubrovin, L.A. Dadinova, M.V. Petoukhov, et al. JMB. 433, 10 (2021).

[5] Y. Chesnokov, A. Mozhaev, R. Kamyshinsky, et al. Int. J. Mol. Sci. 23, 5313 (2022).

[6] Y. Chesnokov, R. Kamyshinsky, A. Mozhaev, et al. Int. J. Mol. Sci. 24, 8534 (2023).

## СЕКЦИЯ 1.3

**Синхротронные и нейтронные исследования (разработки)  
в области социгуманитарных наук**

Председатель: *Терещенко Е.Ю.*

# ИССЛЕДОВАНИЕ И РЕКОНСТРУКЦИЯ ПОЛИХРОМНОЙ РОСПИСИ ЛЕКИФА IV в. до н.э.

**Н.Б. Шалявина<sup>1</sup>, Д.В. Журавлев<sup>1,2</sup>, П.В. Гурьева<sup>1</sup>, Е.С. Коваленко<sup>1</sup>,  
Е.А. Кузьмина<sup>1</sup>, А.Ю. Лобода<sup>1</sup>, О.А. Кондратье<sup>1</sup>, Е.С. Куликова<sup>1</sup>,  
А.В. Мандрыкина<sup>1</sup>, Е.Ю. Терещенко<sup>1</sup>, Е.Б. Яцишина<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Государственный исторический музей

Объектом представленного исследования стал лекиф в виде женской головы IV в. до н.э. из собрания Государственного исторического музея. Он изготовлен из розово-красной глины, обратная сторона покрыта черным лаком, на лицевой сохранились остатки росписи. Высота сосуда – 11 см.

Целью исследования был анализ особенностей конструкции сосуда, идентификация использованных пигментов, выявление окрашенных зон и последующая реконструкция частично утраченной полихромной росписи лицевой поверхности сосуда.

Визуализация внутреннего строения сосуда выполнялась на промышленном рентгеновском томографе X5000 (NSI). Для выявления окрашенных зон применяли рентгенофлуоресцентное картирование на спектрометре M4 Tornado (Bruker). Элементный состав проб определяли методом растровой электронной микроскопии с энергодисперсионным рентгеновским микроанализом на микроскопе Helios (Thermo Fisher Scientific), а минералогический – методом рентгенофазового анализа на станции Белок/РСА Курчатовского источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов».

Согласно томографическим данным лекиф состоял из нескольких элементов: тулова из двух частей, дна, горла и ручки. Выявлены следующие пигменты: киноварь и гематит в области головного убора, гетит и аурипигмент в области волос, египетский синий в смеси с гипсом – в фоне и области глаз. Итогом проведенных работ стала реконструкция полихромной росписи лицевой поверхности лекифа.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Минобрнауки России в рамках Соглашения о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии №075-15-2023-010 от 21.02.2023 (15.СИН.21.0024).

# ИССЛЕДОВАНИЕ ИСКОПАЕМЫХ МОРСКИХ МЛЕКОПИТАЮЩИХ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОЙ И НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ: РЕЗУЛЬТАТЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

**К.К. Тарасенко<sup>1</sup>, Е.С. Коваленко<sup>2</sup>, М.М. Мурашев<sup>2</sup>, А.А. Калоян<sup>2</sup>, К.М. Подурец<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Палеонтологический институт имени А.А. Борисяка РАН*

<sup>2</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

НИЦ «Курчатовский институт» является научным партнером Палеонтологического института им. А.А. Борисяка РАН с 2010 года. В ходе научного взаимодействия изучено более 20 палеонтологических образцов, представленных остатками позднемиоценовых китообразных [1]. Использовались взаимодополняющие методы томографии – синхротронная (томограф на канале 6.3 «КИСИ-Курчатов») и нейтронная («ДРАКОН», ИР-8). К несомненным плюсам томографических установок относится возможность подбирать параметры эксперимента под конкретный образец и исследовать широкий спектр объектов по минеральному составу и размерам. Исследованы кости капсулы внутреннего уха и область перibuлярного синуса различных миоценовых китообразных. Полученные трехмерные модели костного лабиринта позволяют проводить морфофункциональный анализ каменистых костей ископаемых усатых китообразных и получить представления о развитии их вестибулостатических и слуховых органов, локомоции и образе жизни. В ходе исследований обнаружены существенные различия в строении костного лабиринта у представителей двух родов карликовых усатых китов-цетотериид *Kurdalagonus* и *Zygiocetus* [2]. Применение полученных данных позволяет идентифицировать остатки усатых китов на основании лишь одной единственной кости – каменистой кости внутреннего уха [3]. Дальнейшие работы коллектива предполагают создание атласа по морфологии и структуре костей слухового анализатора позднемиоценовых усатых китов для Юга России и прилегающих регионов.

[1] К.К. Tarasenko, E.S. Kovalenko, et al., Micro-CT User Meeting (2017).

[2] К.К. Tarasenko, E.S. Kovalenko, et al., Paleontological Journal V.52, №12 (2018).

[3] Н.В. Зеленков, Е.В. Сыромятникова и др. Палеонтологический журнал, №2 (2022).

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПАЛЕОНТОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОЙ И НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

**А.В. Пахневич<sup>1,3</sup>, Е.С. Коваленко<sup>2</sup>, А.А. Калоян<sup>2</sup>, К.М. Подурец<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Палеонтологический институт имени А.А. Борисяка РАН

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Объединенный институт ядерных исследований

Сотрудничество НИЦ «Курчатовский институт» и Палеонтологического института им. А.А. Борисяка РАН (ПИН РАН) в области применения синхротронной и нейтронной томографии началось в 2010 г.

Синхротронная томография проводилась на экспериментальных станциях «ЛИГА» и «МЕДИ-АНА». В раковинах ископаемых беспозвоночных *Kaninospirifer kaninensis* (пермский период, п-ов Канин) и *Cyrtospirifer rudkinensis* (девонский период, Воронежская обл.) были обнаружены внутрираковинные структуры, которые необходимы для таксономического определения видов. Это привело к проведению большой ревизии брахиопод рода *Kaninospirifer*, впервые выполненной только с помощью синхротронной томографии.

Были получены интересные результаты по использованию фазового контраста для томографии палеонтологических объектов на примере иглокожих *Ristnacrinus sp.* и *Rhipidocystis sp.* из ордовикских отложений Эстонии и Ленинградской обл.

С помощью нейтронной томографии на пучке тепловых нейтронов на ГЭК №5, ИР-8 изучена контрастность различных минералов в нейтронном излучении. Созданная шкала контрастности важна для понимания возможных перспектив использования метода и его результативности для палеонтологических и геологических объектов.

Многие объекты изучались с помощью двух методов томографии. Комплексное исследование помогло расширить представление о внутреннем строении объектов, например, в раковине *Cyrtospirifer rudkinensis* были обнаружены следы fossilized мягких тканей животных. В результате изучения ископаемого экскремента крупной каменноугольной рыбы (Калужская обл.) доказана таксономическая принадлежность животного, выявлены пищевые предпочтения и установлены особенности сохранности объекта.

Дальнейшее сотрудничество развивается в направлении исследования костных остатков позвоночных животных.

# КОМПЛЕКСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КАМЕННЫХ АРТЕФАКТОВ ДАЛЬНЕГО ВОСТОКА

**А.В. Мандрыкина<sup>1</sup>, Е.С. Куликова<sup>1</sup>, А.М. Исмагулов<sup>1</sup>,  
А.Н. Попов<sup>2</sup>, Е.Ю. Терещенко<sup>1</sup>, Е.Б. Яцишина<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>2</sup>*Дальневосточный федеральный университет*

В данной работе были проведены комплексные исследования дальневосточных каменных артефактов различных культур и временных периодов. Неолитические материалы (5.5–2.7 тыс.л. до н.э.) географически локализованы в Южном Приморье (ЮП) – бойсманская археологическая культура, а также в Северо-Восточном Приморье (СВП) – руднинская и веткинская культура. Средневековые артефакты (VII–XIII вв. н.э.) локализованы в Западном Приморье (ЗП).

Для идентификации минералов, использованных при изготовлении изделий, и сопоставления особенностей их состава применялся комплекс методов, в составе которого: рентгенофазовый анализ с использованием синхротронного источника излучения, масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой и растровая электронная микроскопия с энергодисперсионным рентгеновским микроанализом. Полученные данные были систематизированы с применением статистической обработки, в результате чего объекты были разделены на группы. Анализ полученных результатов позволил сделать выводы о видах каменного сырья, использованного мастерами в разные эпохи.

Для нефритовых изделий выявлено, что материалы неолитических украшений СВП имеют схожие характеристики и практически всегда отличаются от объектов ЮП. Данный факт позволяет сделать предположение о месторождениях минералов, использованных при изготовлении предметов: нефриты среднего неолита из СВП имеют близкие друг к другу источники, которые, совершенно отличны от месторождений неолитических нефритов ЮП. Однако, по полученным данным нефриты неолита ЮП и частично средневековья ЗП, вероятно, могли иметь одинаковый источник.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Минобрнауки России в рамках Соглашения о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии №075-15-2023-010 от 21.02.2023 (15.СИН.21.0024).

## ДВЕ ТЕРРАКТОВЫЕ ПЛИТЫ ИЗ ГМИИ ИМ. А.С. ПУШКИНА

Т.А. Ильина<sup>1</sup>, Е.А. Бойко<sup>1</sup>, О.С. Синицын<sup>1</sup>, Н.Г. Кравцова<sup>1</sup>, П.В. Гурьева<sup>2</sup>,  
С. Коваленко<sup>2</sup>, К.М. Подурец<sup>2</sup>, Е.Ю. Терещенко<sup>2</sup>, Е.Б. Яцишина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Государственный музей изобразительных искусств имени А.С. Пушкина

<sup>2</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

В собрании ГМИИ им. А.С. Пушкина хранятся две терракотовые плиты размером  $0.98 \times 0.48 \times 0.05$  м с изображением женской головы, обрамленной листьями и цветами (ринсо), предположительно августовского времени. Плиты идентичны друг другу, а также еще шести рельефам – 2 шт. в Лувре (Франция) и 4 шт. в Новой глиптотеке Карлсберга (Дания). В Грегорианском музее (Ватикан) хранится  $\sim 1/4$  матрицы для их оттиска. Все предметы имеют антикварное происхождение, подобные целые предметы или их фрагменты неизвестны. Термолюминесцентный анализ луврских плит показал датировку 18–19 в. Все это ставит под сомнение подлинность данной группы предметов в целом и делает необходимым их исследование.

Рентгеновская томография внутреннего строения плит проводилась на томографе X5000 (NSI). По томографическим данным выявлена технология изготовления и предпродажной реставрации. Правая и левая части плит формованы отдельно – стыковочный шов, также как и у шести других плит, совпадает с обломанным краем матрицы. В дальнейшем обе плиты были разбиты. В ходе реставрации фрагменты терракотовых плит были прикреплены на сланцевое основание, дополнительно, в одной из плит, использовались металлические штифты. Также штифты были установлены в местах реставрационных восполнений на обеих плитах. Утраченные фрагменты были воссозданы методом отливки в форму по месту. Перед заливкой затвердевающим составом (предположительно, гипсом) области крупных утрат были заполнены небольшими черепками или мелким камнем. Судя по внешнему виду, аналогичным образом были смонтированы датские рельефы, приобретенные в то же время.

# ДРАГОЦЕННЫЙ МЕТАЛЛ СРЕДНЕВЕКОВЫХ ГОРОДОВ КРЫМА

**А.В. Антипенко<sup>1,3</sup>, А.Ю. Лобода<sup>2</sup>, Э.А. Хайрединава<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>*Институт археологии Крыма РАН*

<sup>2</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>3</sup>*Лаборатория «Византийский Крым» ФГАОУ ВО «КФУ имени В.И. Вернадского»*

Изделия из драгоценных металлов – ценная и редкая находка при раскопках средневековых городов Крыма. Анализ частоты использования различных сплавов позволяет лучше понять ремесленное производство и торгово-экономические связи поселений. В представленной работе рассматривается драгоценный металл средневекового Крыма на примере золотых и серебряных изделий из раскопок средневекового городища на плато Эски-Кермен.

На плато Эски-Кермен найдено три высокопробных золотых изделия – серьги в виде знака вопроса (Au до 92,71%). Еще два изделия (бляшка и перстень), скорее всего, являются результатом вторичной переплавки металла. Они выполнены из тройного сплава (Au, Ag, Cu) и схожи по содержанию основных компонентов.

Сплавы серебряных изделий Эски-Кермена можно разделить на три группы:

- 1) Высокопробное серебро (выше 80%) – вероятно, «оригинальные» сплавы.
- 2) Серебро 65–80%, медь 15–30%.
- 3) Серебро 40–65%, медь 30–55%.

Вторая и третья группы, скорее всего, являются результатом вторичного использования металлов.

Изделия из высокопробного золота, найденные на плато, представляют собой миниатюрные украшения. Более массивные изделия золотого цвета выполнены либо из сплава золота и серебра, либо из позолоченного путем амальгамирования серебра. Значительная часть серебряных изделий – высокопробные сплавы. Предположение об использовании местными мастерами низкопробных серебряных сплавов не находит достаточной аргументации, поскольку известно, что ювелиры Византии и всего Востока пользовались как высокопробными сплавами, так и сильно разбавленным медью серебром с большим количеством микропримесей.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, Мегагрант №075-15-2022-1119.

# РОЛЬ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ В НАУЧНОЙ РЕСТАВРАЦИИ АРХЕОЛОГИЧЕСКИХ ПРЕДМЕТОВ

В.П. Кузнецова<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Государственный Исторический музей*

Отдел археологии — один из старейших в Историческом музее, в нем насчитывается около 1,5 млн. единиц хранения. Эти предметы происходят из различных археологических памятников, отражающих длительный период в истории человечества — от эпохи каменного века до позднего средневековья. География этих памятников чрезвычайно широка — от Дальнего Востока и Кавказа до Польши и берегов Северного Ледовитого океана. Коллекция продолжает пополняться за счёт раскопок, проводимых музеем.

Изучение памятников материальной культуры естественнонаучными методами — неотъемлемая часть реставрационного процесса. Научная реставрация, прежде всего, связана с максимальным сохранением информации, которую несёт в себе археологический предмет. Благодаря физико-химическим методам исследования удаётся узнать мельчайшие подробности жизни предмета от момента его изготовления и бытования до извлечения из почвы.

Естественнонаучное изучение археологических объектов возможно с применением двух разных подходов. Первичное исследование объекта возможно для изделий, недавно извлеченных из почвы. В данном случае изучение предмета проводится, когда он поступает в реставрационную лабораторию. Анализы позволяют более полно охарактеризовать материал, из которого изготовлен объект, особенности примененных технологий, определить состав красителей и связующих материалов. Такой подход позволяет всесторонне изучить артефакт и подобрать подходящую стратегию реставрационных работ. Второй подход к изучению археологических изделий заключается в исследовании артефактов уже прошедших все этапы реставрации и хранящихся в музейных коллекциях. В некоторых случаях предмет нуждается в дополнительном изучении для уточнения его сохранности или расширении известного материаловедческого и исторического контекста.

В качестве примеров таких работ приводятся исследования археологических предметов из различных материалов из коллекции Государственного исторического музея.

# ИССЛЕДОВАНИЯ ДРЕВНЕРУССКИХ КРЕСТОВ-ТЕЛЬНИКОВ XI–XII вв. ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Pb-Sn И Sn-Pb МЕТОДАМИ НЕЙТРОННО-РАДИАЦИОННОГО АНАЛИЗА И СИНХРОТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ

Э.А. Грешников<sup>1</sup>, Л.И. Говор<sup>1</sup>, В.А. Куркин<sup>1</sup>, Р.Д. Светогоров<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Методом нейтронно-радиационного анализа (НРА) на пучке быстрых нейтронов на горизонтальном канале №2 реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт» и методом порошковой рентгеновской дифракции на станции Белок/РСА Курчатовского источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» исследованы элементный и фазовый состав пяти древнерусских крестов – тельников XI–XII вв., найденных в поселениях Суздальского Ополья экспедицией Института археологии РАН.

В результате измерений установлено, что предметы личного благочестия были изготовлены из сплавов Pb-Sn (1 экз.) и Sn-Pb (4 экз.). В металле одного из крестов выявлены характерные химические элементы и фазы литаргита и соединений кальция и фосфора (рис. 1–2), которые формируются в структуре металла в результате применения древнего процесса купелирования первичной свинцовой руды.

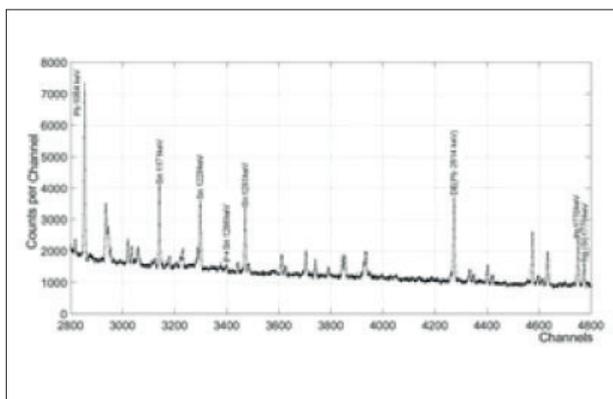


Рис.1. Области спектров сплава креста-тельника из Шекиново-2 по результатам НРА

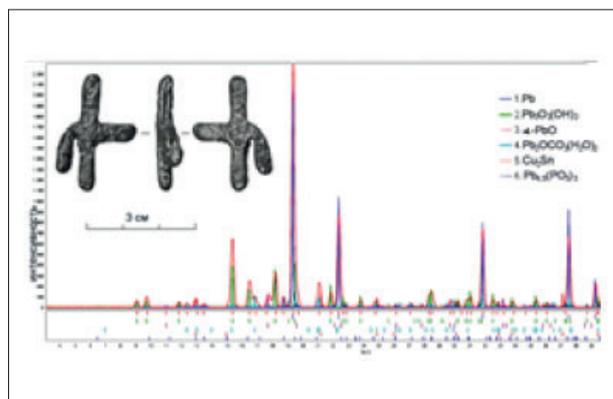


Рис.2. Фазы химических соединений сплава креста-тельника из Шекиново-2

[1] B. Girbal, 2011. Roman and Medieval Litharge Cakes: A Scientific Examination., English Heritage, 2, 51, 80 p.

[2] R. Svetogorov, P. Dorovatovskii, V. Lazarenko., Cryst. Res. Technol, 2020, 55.5, 1900184.

# РИМСКИЕ МОНЕТЫ ЭПОХИ ИМПЕРИИ: АНАЛИЗ МЕТОДОМ НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ НА КУРЧАТОВСКОМ НЕЙТРОННОМ ИСТОЧНИКЕ И ЭЛЕМЕНТНОЕ КАРТИРОВАНИЕ

М.М. Мурашев, О.А. Кондратьев, Э. А. Грешников, Е.А. Созонтов

В продолжение начатого нами ранее [1] изучения двух римских монет (III-IV вв. нашей эры) эпохи империи, проведены дополнительно уточняющие исследования. Изучаемые монеты найдены в ходе работ Патрейской экспедиции ИА РАН под руководством А.П. Абрамова в 2002 г. (пос. Гаркуша Краснодарского края). **Методы исследования:** нейтронная томография на Курчатовском нейтронном источнике, элементное картирование на лабораторном источнике (Tornado-M4, Bruker) и комплементарные методы.

На рис. 1б, в качестве примера, представлены томографические срезы монеты №1 в трех взаимно перпендикулярных сечениях. Анализ данных рис. 1б позволяет утверждать, что монета состоит из сердечника и поверхностного серебряного слоя, сильно ослабляющего нейтроны. На рис. 1в,г представлены распределения ртути и серебра на поверхности монеты.

**Заключение.** В результате проведенных исследований, установлено, что каждая из монет состоит из сердечника (сплав Cu-Sn-Pb-Ag) и покрытия (Ag-Cu). Установлено, что процесс серебрения осуществлялся с использованием серебряной амальгамы – ртуть была обнаружена (рис. 1в) в приповерхностном серебряном слое монет. Полученные данные позволяют утверждать, что обе монеты являются имитациями полноценных серебряных монет. Томографические данные получены со всего объема монет, что дополняет результаты, полученные нами ранее [1] методами локального поверхностного анализа (РФА, ЭРМ).

Работа выполнена по пункту 1п5.1 тематического плана НИЦ КИ.

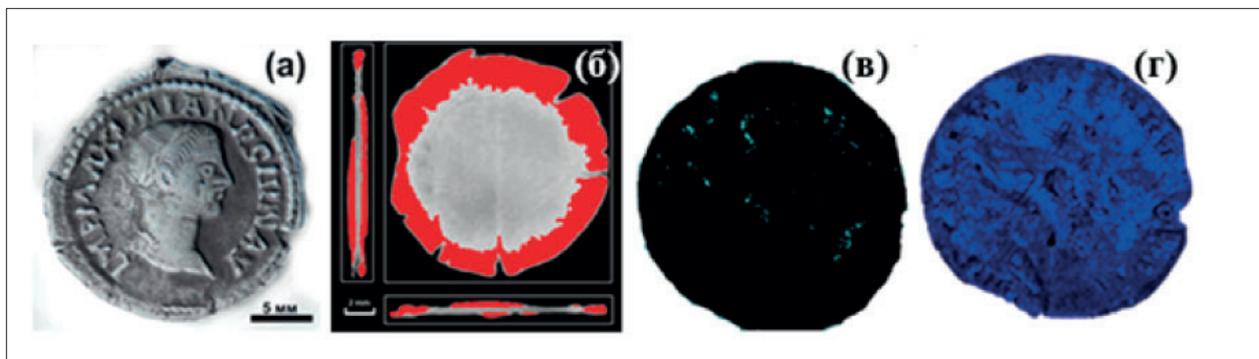


Рис. 1. (а) – фотография монеты №1; (б) – томографические срезы монеты в трех взаимно перпендикулярных направлениях; карты распределения ртути (в) и серебра (г)

[1] E.A. Sozontov, E.A. Greshnikov, I. N. Trun'kin, et al., Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 17, 500–504 (2023).

## СЕКЦИЯ 1.5

**Развитие ускорительных реакторных технологий,  
приборно-инструментальной базы для оснащения  
экспериментальных станций источников  
синхротронного излучения и нейтронов**

Председатель: *Корчуганов В.Н.*

# ПРОЕКТ «РАЗРАБОТКА И СОЗДАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ СТАНЦИЙ НА ИСТОЧНИКАХ НЕЙТРОНОВ ИМПУЛЬСНОГО ИЛИ ПОСТОЯННОГО ТИПА». ТЕКУЩЕЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ

**В.И. Боднарчук<sup>1,2</sup>, А.В. Белушкин<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>ЛНФ ОИЯИ

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

В рамках проекта «Разработка и создание элементов экспериментальных станций на источниках нейтронов импульсного или постоянного типа» (Соглашение от 13 октября 2021 г. №075-10-2021-115) решаются задачи по разработке ключевых элементов экспериментальных станций для исследований на выведенных пучках нейтронов. В реализации проекта участвуют все ведущие коллективы, имеющие отношение к нейтронным исследованиям: Объединенный институт ядерных исследований, Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» ПИЯФ, Институт ядерных исследований РАН, Институт физики металлов Уральского Отделения РАН. Привлечены ведущие университеты России, такие как МФТИ, Казанский Федеральный университет, Государственный университет Дубна.

Основные усилия направлены на разработку детекторных систем для установок по нейтронному рассеянию различного назначения. В частности, в ходе реализации проекта отработана технология нанесения тонкопленочных покрытий из карбида бора на различные основания и на основе их разработаны несколько типов детекторов. Разрабатываемые в ходе реализации проекта технологии и научно-методические решения (технология нанесения тонкопленочных покрытий из карбида бора на различные основания, разработка новых оригинальных детекторов для разного типа установок) позволят наладить производство и обеспечить все ведущие нейтронные центры России детекторами, обладающими требуемыми параметрами по быстродействию, пространственному и временному разрешению. В ходе работ отрабатываются новые технологии, решаются научно-методические задачи, позволяющие перейти от поисковых исследований к мелкосерийному производству. Уже в настоящее время есть запрос от ряда научных коллективов, занимающихся созданием и эксплуатацией станций нейтронного рассеяния на новые разработки, полученные в ходе реализации проекта. Значительный интерес проявляется также со стороны предприятий реального сектора экономики, связанных с ядерной энергетикой.

Значительное внимание в рамках проекта уделяется образовательным программам, направленным на подготовку специалистов для эксплуатации исследовательской инфраструктуры класса «Мега-саенс». Разработан ряд учебных модулей и образовательных программ, в составлении которых принимают участие ведущие специалисты в области методов исследований с помощью рассеяния нейтронов.

## НОВЫЙ ИСТОЧНИК СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КИСИ-2

**Е.А. Фомин<sup>1</sup>, В.Н. Корчуганов<sup>1</sup>, А.С. Смыгачева<sup>1</sup>,  
В.А. Ушаков<sup>1</sup>, А.Г. Валентинов<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»*

Курчатовский источник синхротронного излучения на базе 2.5 ГэВ накопителя электронов является источником поколения 2+ с горизонтальным эмиттансом 98 нм·рад. Периметр основного накопителя составляет 124.13 м. В настоящее время в составе комплекса работают 13 экспериментальных станций и еще четыре находятся в стадии строительства. Основным источником синхротронного излучения являются поворотные магниты с полем 1.7 Т с характеристической энергией фотонов 7.07 кэВ. Полный спектральный диапазон синхротронного излучения простирается от 0.1 до 2000 Å. Для расширения экспериментальных возможностей комплекса в прямолинейные промежутки основного накопителя установлены три сверхпроводящих вигглера (один с максимальным полем 7.5 Т и два с полем 3 Т).

Улучшение потребительских качеств пучков – яркости и интенсивности синхротронного излучения – требует модернизации всего ускорительного комплекса и перевода основного накопителя в разряд источников третьего поколения с эмиттансом электронного пучка менее 5 нм·рад.

В настоящее время в НИИЦ «Курчатовский институт» приступили к реализации проекта модернизации комплекса. На базе существующей инфраструктуры взамен действующего источника синхротронного излучения будет построен новый источник с натуральным эмиттансом менее 3 нм·рад. Для обеспечения «непрерывной» работы источника синхротронного излучения будет создан новый инжекционный комплекс, включающий в себя бустерный синхротрон на энергию электронов (0.2–2.5) ГэВ и линейный ускоритель электронов на 200 МэВ.

Обязательным требованием к новому комплексу является сохранение всех действующих в настоящее время экспериментальных станций, сверхпроводящих вигглеров и действующей ВЧ системы основного накопителя.

# СОЗДАНИЕ ТОМСКОГО ЦЕНТРА КОМПЕТЕНЦИЙ В ОБЛАСТИ ПУЧКОВО-ПЛАЗМЕННОЙ ИНЖЕНЕРИИ И СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

**М.С. Сыртанов<sup>1</sup>, А.Д. Тересов<sup>1</sup>, В.В. Денисов<sup>1</sup>, Н.Н. Коваль<sup>1</sup>,  
Н.А. Ратахин<sup>1</sup>, А.Н. Шмаков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт сильноточной электроники СО РАН*

На сегодняшний день наиболее распространенными методами нанесения покрытий функционального и конструкционного назначения являются электродуговое осаждение и магнетронное распыление [1]. Для аттестации фазового состава и структуры модифицированных материалов традиционно используются методы, основанные на использовании рентгеновского излучения [2]. Однако, использование источников синхротронного излучения (СИ) позволяет проводить исследования на качественно другом уровне. Например, использование пучков СИ позволяет получать информацию об изменении структуры и фазового состава материалов непосредственно в процессе синтеза (*in situ*) или эксплуатации в условиях максимально приближенных к реальным. Исследования такого рода имеют огромный потенциал для реального сектора экономики. Однако, промышленные предприятия сталкиваются с проблемой разработки специализированного оборудования для проведения исследований на станциях источников СИ, а также недостаточной квалификацией сотрудников в области применения методов анализа материалов, основанных на синхротронном излучении.

Настоящий доклад посвящен основным задачам Томского центра компетенций в области пучково-плазменной инженерии и синхротронных исследований, созданного на базе ИСЭ СО РАН. Представлена информация о лабораториях центра и их деятельности, специализированном оборудовании для пучково-плазменной модификации поверхности, используемом на канале №6 накопителя электронов ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН, а также результатах дифракционных измерений в процессе синтеза функциональных покрытий. Особое внимание уделено программам профессиональной переподготовки и повышения квалификации в области синхротронного и нейтронного излучений, разработанных при участии ведущих ВУЗов Томска.

Работы выполнены при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Министерства науки и высшего образования (проект №075-15-2021-1348).

[1] C.Y. Lee, S.J. Lin, J.W. Yeh, Surf. Coat. Technol. 468 (2023): 129757.

[2] A.U. Rao, et al., J. Mater. Sci.. (2023): 1–50.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЙТРОНОВОДОВ ДЛЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ИСТОЧНИКОВ НЕЙТРОНОВ

**А.И. Попов<sup>1,2</sup>, Е.А. Кравцов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина*

<sup>2</sup>*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН*

Современные тенденции в нейтронной физике состоят в выводе из эксплуатации среднепоточных нейтронных реакторов и строительстве вместо них крайне ограниченного числа высокопоточных источников нейтронов. Пучковое время на этих реакторах будет крайне ограничено и, скорее всего, будет предполагать проведение исключительно уникальных экспериментов. Большинство задач в исследованиях конденсированных сред не требуют таких больших потоков нейтронов и решаются на среднепоточных реакторах. Выходом является строительство компактных источников нейтронов, в которых за счет оптимизации небольшого числа инструментов можно добиться тех же потоков нейтронов, как и на среднепоточных реакторах.

Нейтроны на компактном источнике получают за счет низкоэнергетических реакций при бомбардировке протонами мишени, причем, при этом не производятся и используются делящиеся материалы, и установка является экологически чистой.

В настоящем докладе рассматриваются особенности разработки нейтронных скций, а так же системы прерывателей для обеспечения требуемых заказчиком параметров установки.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения №075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения №075-15-2021-1358 от 12 октября 2021 г.).

# ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ НА БАЗЕ СИНХРОТРОННОГО КОМПЛЕКСА ФИАН

**Н.Н. Колачевский<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт  
имени П.Н. Лебедева Российской академии наук*

Развитие перспективных ядерно-физических технологий осуществляется в ФИАН на базе синхротронного комплекса, базовой основой которого является протонный синхротрон, разработанный в ФТЦ ФИАН в г. Протвино.

Представлены ключевые результаты первого и планы второго этапов проекта «Разработка новых технологий диагностики и лучевой терапии социально значимых заболеваний протонными и ионными пучками с использованием бинарных ядерно-физических методов», реализуемого ФИАН при поддержке Минобрнауки в рамках Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы.

Представлен проект создания на московской площадке ФИАН Центра ядерно-физических биомедицинских технологий, нацеленного на решение актуальных фундаментальных и прикладных задач по разработке прорывных технологий в области ядерно-физических методов медицины, материаловедения и космической биомедицины и подготовке высококвалифицированных кадров по этим направлениям с привлечением московских исследовательских центров и образовательных организаций.

# РАЗРАБОТКА СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ВИГГЛЕРА С ПОЛЕМ 2.7 Тл И ПЕРИОДОМ 27 мм ДЛЯ СТАНЦИИ «БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИЕ ПРОЦЕССЫ» НА ИСТОЧНИКЕ СКИФ

А.А. Седов<sup>1</sup>, Н.А. Мезенцев<sup>1</sup>, С.В. Хрушев<sup>1,2</sup>, В.М. Цуканов<sup>1,2</sup>, В.А. Шкаруба<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт ядерной физики имени Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук

В настоящий момент ведется строительство нового источника синхротронного излучения СКИФ. В первой очереди строительства источника предполагается ввести в эксплуатацию 6 станций, среди которых станция 1–3 быстропротекающие процессы. На данной станции будут реализованы методики рентгенографии и дифрактометрии с высоким временным разрешением. Для проведения исследований на секции «Динамические процессы» требуется излучение в диапазоне от 20 до 40 кэВ, на секции «Плазма» до 70 кэВ с максимальным потоком фотонов на один электронный сгусток [1].

Для удовлетворения всех поставленных требований на станции в качестве вставного устройства будет использован вигглер оптимизированный на максимальную плотность потока фотонов на оси при энергии фотонов 35 кэВ для пучка электронов с энергией 3 ГэВ. Параметры вигглера соответственно: магнитное поле 2.7 Тл, период 27 мм при величине магнитного зазора 7 мм и количестве основных полюсов 144.

В данной работе при помощи программы для моделирования магнитных полей Mermaid и программного пакета Mathcad были проведены расчеты и оптимизация параметров основных и краевых полюсов магнита, а также величины первого и второго интегралов магнитного поля. Для проверки правильности расчетов был изготовлен и протестирован короткий прототип из 20 катушек. Успешное испытание прототипа позволило принять решение об изготовлении полного вигглера. Оба испытания были проведены в погружном криостате при гелиевых температурах с помощью датчиков Холла. В программе Mathcad были проведены расчеты влияния поля вигглера на параметры и динамику пучка электронов.

В результате проделанной работы был собран и успешно испытан 144-полюсный сверхпроводящий вигглер с периодом 27 мм и уровнем магнитного поля 2,7 Тл для станции 1-3 «Быстропротекающие процессы». Результаты измерений достаточно хорошо совпадают с модельным распределением поля вигглера.

[1] И.А. Рубцов, Э.Р. Прууэл, К.А. Тен и др. Концептуальный проект Станции 1–3 «Быстропротекающие процессы»: Электронный сборник статей. Новосибирск. – 2022. Т. 1, с. 116–132.

# КОГЕРЕНТНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ОПТИКА ДЛЯ ИСТОЧНИКОВ 4-го ПОКОЛЕНИЯ

А.А. Снигирев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Международный научно-исследовательский центр «Когерентная рентгеновская оптика для установок «Мегасайенс», Балтийский Федеральный Университет имени И. Канта

Уникальные характеристики дифракционно-ограниченных пучков на источниках 4-го поколения определяют беспрецедентные требования к выбору рентгеновской оптики, предназначенной в первую очередь для транспорта пучка. несовершенство оптических элементов, вызванное технологическими ограничениями, а также механической и термической нестабильностью приводят к деградации волнового фронта и когерентности излучения. Переход на коаксиально симметричные пучки существенно ограничивает возможности манипуляции с горизонтальной или вертикальной схемой рассеяния отражающей или дифракционной оптики.

В связи с этим, дальнейшая разработка преломляющей *in-line* оптики имеет решающее значение. Преломляющая оптика успешно используется на всех современных источниках синхротронного излучения и лазерах на свободных электронах. Такое стремительное развитие обусловлено успехами в разработке и производстве как самих линз, так и трансфокаторов - перестраиваемых в широком диапазоне энергий зум-объективов на основе преломляющих линз. Помимо решения традиционных задач фокусировки излучения, рефракционная оптика может использоваться в качестве конденсоров с регулируемым размером пучка; коллиматоров, обеспечивающих микро-радианную расходимость; монохроматоров и фильтров для подавления высоких гармоник. Реализация системы транспортировки пучка на основе преломляющих линз значительно упрощает геометрию большинства новых станций, что открывает новые возможности для научных исследований.

Следует отметить, что область применения преломляющей оптики не ограничивается только транспортом пучка, а может быть расширена в направлении развития новых методов фазово-контрастной светло-польной и дифракционной темно-польной микроскопии. Много-линзовые системы открывают возможность разработки новых методов рентгеновской интерферометрии для изучения природных и искусственных нано-материалов, самоорганизующихся биосистем, фотонных и коллоидных кристаллов.

При создании в России источников 4-го поколения, безусловно, следует использовать мировой опыт перехода источников с 3-го на 4-е поколение. Но создание полностью новых *green-field* установок дает нам несомненное преимущество избежать ошибок и копирования устаревших схем и технических решений при строительстве экспериментальных станций.

# ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ ПРОЕКТИРУЕМЫХ ОНДУЛЯТОРОВ СИЛА

**Н.В. Смоляков<sup>1</sup>, А.С. Комлев<sup>1</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

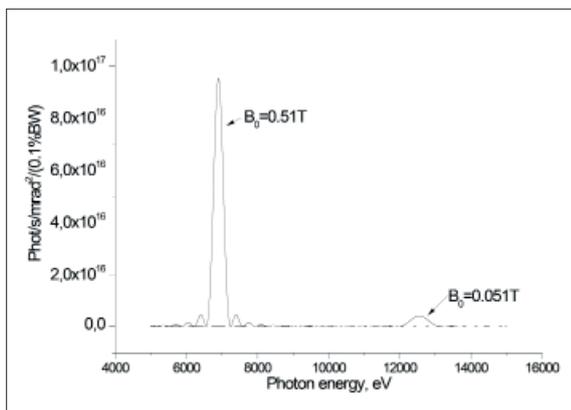


Рис. 1. Спектрально-угловая плотность излучения вдоль оси плоского ондулятора с периодом 27 мм

В рамках реализации проекта ускорительно - накопительного комплекса источника синхротронного излучения с лазером на свободных электронах «СИЛА» [1] в настоящее время ведутся научные и конструкторские разработки ондуляторов на основе постоянных (редкоземельных) магнитов. На начальном этапе разрабатываются два типа ондулятора: плоский с периодом 27 мм и ондулятор спирального типа APPLE-II с периодом 71 мм. Магниты плоского ондулятора имеют форму параллелепипедов 45 x 14 x 6.75 мм. Для предварительных расчетов остаточная намагниченность магнитных блоков из NdFeB предполагалась однородной и равной 1.2 Т. При межполюсном зазоре 12 мм амплитуда магнитного поля в медианной плоскости такого ондулятора равна 0.51 Т, параметр ондуляторности  $K = 1.29$ .

На начальном этапе предполагается изготовить макеты с 10-ю и 20-ю периодами. На рис. 1 показана спектрально-угловая плотность потока фотонов вдоль оси ондулятора с параметрами: 20 периодов, энергия пучка электронов 6 ГэВ, его ток – 100 мА, амплитуда магнитного поля 0.51 Т (максимум интенсивности при 6901 эВ) и 0.051 Т (максимум интенсивности при 12552 эВ).

Также рассчитаны спектральные и пространственные распределения из такого ондулятора при энергии пучка электронов 2.5 ГэВ.

Для ондулятора типа APPLE-II с периодом 71 мм рассчитаны спектральные и пространственные распределения излучения для двух режимов его работы: плоская конфигурация и спиральная конфигурация. Энергии пучка электронов также предполагались равными 6 ГэВ и 2.5 ГэВ.

[1] М.В. Ковальчук, А.Е. Благов и др., Кристаллография, т. 67, №5, с. 726 (2022).

## СЕССИЯ 2

### **Концепция и научная программа синхротронно-лазерного комплекса «СИЛА»**

#### СЕКЦИЯ 2.1

### **Концептуальные проекты и научные программы экспериментальных станций первой очереди источника синхротронного излучения**

Председатели: *Благов А.Е. и Якунин С.Н.*

## ПРОЕКТ СИНХРОТРОННОЙ СТАНЦИИ «КОГЕРЕНТНЫЙ НАНО-АНАЛИЗ»

**А.Ю. Серегин<sup>1,2</sup>, П.А. Просеков<sup>1,2</sup>, В.Г. Кон<sup>1,2</sup>, М.С. Фоломешкин<sup>1,2</sup>, А.Г. Куликов<sup>1,2</sup>,  
Ю.А. Волковский<sup>1,2</sup>, Ю.В. Писаревский<sup>1,2</sup>, А.Е. Благов<sup>1,2</sup>, М.В. Ковальчук<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Представлен проект синхротронной станции «Когерентный нано-анализ» (КНА) для источника синхротронного излучения «СИЛА». Станция КНА разрабатывается как инструмент исследования трехмерной структуры органических и неорганических макро-, микро- и наносистем с предельным для методов рентгеновской микроскопии пространственным разрешением менее 5 нм. Достижение рекордного разрешения будет возможно благодаря высокой яркости и доле когерентных фотонов пучка СИ источника 4-го поколения, использованию нанофокусирующей рентгеновской оптики и применению современных методов визуализации и микроскопии. Использование высокоинтенсивного когерентного пучка позволит значительно увеличить чувствительность методов когерентной визуализации (когерентный дифракционный имиджинг, микроскопия фазового контраста, томография и др.) и получить дифракционно-ограниченный размер фокуса для методов сканирующей рентгеновской микроскопии (психография, нанотомография, рентгенофлуоресцентный анализ и др.).

Проведение исследований с нанометровым пространственным разрешением накладывает особые требования на общую стабильность экспериментальной схемы, особенно при проведении экспериментов в режиме сканирования образца нанопучком. Кроме того, оптическая схема должна позволять гибко манипулировать параметрами когерентного или частично когерентного пучка для удобной работы в экспериментальной части станции с микро- и нанофокусирующей оптикой различного типа. Планируется несколько основных режимов работы станции: режим работы с использованием когерентного пучка, сфокусированного до рекордных значений менее 5 нм (режим высокого разрешения); основной режим с использованием когерентного пучка размером 5–100 нм в широком диапазоне энергий (режим высокой когерентности); режим высокой яркости с использованием частично когерентного пучка размером 100–1000 нм в широком диапазоне энергий (режим высокой яркости).

# СТАНЦИЯ НАНОДИФРАКЦИИ НА НОВОМ ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ СИЛА 4+ ПОКОЛЕНИЯ

М.М. Борисов<sup>1</sup>, И.А. Лихачев<sup>1</sup>, Э.М. Пашаев<sup>1</sup>, И.А. Субботин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

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

Получение новых знаний о материалах на наноуровне позволит вносить коррективы в технологический процесс формирования наносистем и управлять их физическими, оптическими и химическими свойствами, осуществлять систематический контроль структурного качества и морфологии функциональных элементов, в том числе микроэлектронных устройств, металлоорганических солнечных элементов, электродов батарей, сверхпроводниковых устройств и т.д. Разработка новых материалов с заданными параметрами (в том числе композитных материалов и органо-неорганических гибридных систем) является базовой платформой для создания как принципиально новых приборов, так и устройств с характеристиками, значительно превосходящими существующие.

Для решения поставленных задач необходим синхротронный пучок с высокой яркостью и высокой степенью когерентности, что открывает принципиально новый класс экспериментальных методик, планируемых к реализации на станции: метод нанодифракции (nano-XRD), рентгеновское картирование по поверхности (nanoXRD-mapping), а также флуоресцентное картирование, методы Брэгговской когерентной дифракционной визуализации (Bragg-CDI) и птайхографии ( Ptychography). На станции нанодифракции предлагается использование различных функциональных приставок для проведения *in-situ* и *in-operando* исследований.

Результаты исследований на станции будут востребованы в микроэлектронике, приборостроении, металлургии и машиностроении, энергетике, космических технологиях, биотехнологии, физической химии и др.

# ПРОЕКТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СТАНЦИИ «ПОВЕРХНОСТЬ И ИНТЕРФЕЙСЫ» НА ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ 4-ГО ПОКОЛЕНИЯ

Н.Н. Новикова<sup>1</sup>, С.Н. Якунин<sup>1</sup>, К.В. Николаев<sup>1</sup>, Л.Р. Муфтахова<sup>1,2</sup>, А.В. Рогачев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Современные прецизионные рентгеновские методы позволяют проводить исследования на интерфейсах и поверхностях отдельных нанообъектов, а также изучать кинетику процессов структурообразования в двумерных ансамблях самой различной природы. Поверхность и интерфейсы – это проект синхротронной станции для проведения рентгеновских исследований на жидких и твердых интерфейсах. Набор экспериментальных методов реализуется двумя многофункциональными инструментами. Жидкостной дифрактометр предназначен для исследований с Ленгмюровской ванной и со специализированными ячейками для изучения интерфейсов жидкость / твердое тело, жидкость / жидкость, включая исследования на поверхности расплавов. Твердотельный гониометр с выносным двумерным детектором позволит проводить исследования на когерентных пучках трехмерных периодических структур, разрешать картины рассеяния в малых углах.

Станция реализует широкий спектр поверхностно-чувствительных методик, применяемых для нанодиагностики жидких и твердых интерфейсов: рентгеновская рефлектометрия (XRR), дифракция скользящего падения (GID), малоугловое рентгеновское рассеяние в скользящей геометрии (GISAXS), стоячие рентгеновские волны (XSW), рентгеновская спектроскопия поглощения (XANES/EXAFS) в скользящей геометрии, малоугловое рентгеновское рассеяние критической размерности (CD-SAXS/CD-GISAXS), трехмерные стоячие рентгеновские волны (3D XSW), а также когерентная рентгеновская дифракционная визуализация (CDI).

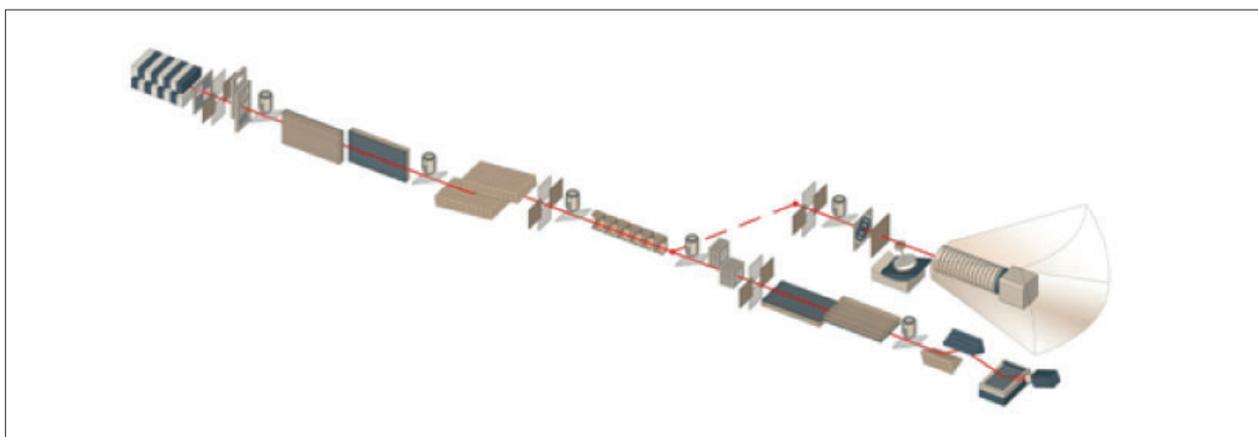


Рис. 1. Рентгенооптическая схема станции «Поверхность и интерфейсы»

## ПРОЕКТ СТАНЦИИ ВИЗУАЛИЗАЦИИ

А.А. Калоян<sup>1</sup>, Е.С. Коваленко<sup>1</sup>, К.М. Подурец<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

На источнике синхротронного излучения 4-го поколения «СИЛА» в числе станций первой очереди планируется создание станции многомасштабной визуализации. Потребность в такой станции диктуется такими отраслями, как медицина, материаловедение, исследование объектов культурного наследия и многими другими. Критическими обстоятельствами, реализуемыми на источнике синхротронного излучения 4-го поколения, являются малый эмиттанс и высокая энергия пучка электронов. Результатом этих обстоятельств является возможность фазоконтрастной визуализации крупных сильно ослабляющих объектов габаритами до  $1 \times 1 \times 1$  м и массой до 300 кг. Для реализации этих возможностей необходимо использовать трехполюсный вигглер в качестве источника излучения, большие расстояния от источника до объекта (200 м) и от объекта до детектора (до 25 м) и высокоточный сканер для перемещения крупных объектов. Для проведения исследований методом иерархической томографии станция будет оснащена детекторами с пространственным разрешением от 1 до 100 мкм, взаимозаменяемыми в процессе измерений и перемещающимися вдоль пучка. Для модификации спектра излучения на объекте планируется использование регулировки поля вигглера, набора фильтров и монохроматора на основе преломляющей оптики.

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СТАНЦИЯ «СЕРИЙНАЯ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ» НА ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ 4-го ПОКОЛЕНИЯ «СИЛА»

**В.А. Лазаренко<sup>1</sup>, П.В. Дороватовский<sup>1</sup>, Р.Д. Светогоров<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»*

В настоящее время разрабатывается новая установка «СИЛА» (синхротрон-лазер), которая не будет иметь аналогов в мире и превзойдет по техническим характеристикам существующие международные источники синхротронного излучения. Ввод объекта в эксплуатацию запланирован на 2032 год.

На синхротроне «СИЛА» будут реализованы 12 экспериментальных станций «первой очереди» с возможностью расширения списка станций до более чем 40. Один из двенадцати каналов будет посвящен исследованиям в области кристаллографии макромолекул.

Рентгеновская кристаллография макромолекул, несмотря на бурное развитие методов электронной микроскопии, до сих пор остается основным методом получения трехмерной структуры макромолекул, возможности которого были расширены методом серийной кристаллографии [1–2]. Источником излучения был выбран ондулятор, который покрывает весь необходимый диапазон энергий для задач макромолекулярной кристаллографии. Будущая станция «серийной макромолекулярной кристаллографии» сможет работать в нескольких режимах. Благодаря трем трансфокаторам схема фокусировки рентгеновского излучения сможет работать в «режиме розового пучка», в «режиме широкого пучка» и в «режиме микрофокусного пучка». Кроме того, благодаря планируемым возможностям дифрактометра можно будет быстро сканировать кристаллизационные планшеты и «каптоновые сетки – mesh», а также собирать данные серийной кристаллографии с нескольких разных кристаллов (планируется реализация только методов «фиксированной мишени»).

Высокая яркость источника, оптическая схема станции и широкие возможности окружения образца сделают станцию «серийной макромолекулярной кристаллографии» флагманом на территории РФ для анализа кристаллов белков, вирусов и других макромолекулярных комплексов.

[1] T. Ursby et al. MicroMAX–new opportunities in macromolecular crystallography //ACTA CRYSTALLOGRAPHICA A-FOUNDATION AND ADVANCES. – 2 ABBEY SQ, CHESTER, CH1 2HU, ENGLAND : INT UNION CRYSTALLOGRAPHY, 2021. – Т. 77. – С. 817.

[2] A.R. Pearson, Mehrabi P. Serial synchrotron crystallography for time-resolved structural biology //Current Opinion in Structural Biology. – 2020. – Т. 65. – С. 168–174.

# СТАНЦИЯ «СТРУКТУРНАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ» СИНХРОТРОННО-ЛАЗЕРНОГО КОМПЛЕКСА «СИЛА»

**Р.Д. Светогоров<sup>1</sup>, Е.С. Куликова<sup>1</sup>, Н.А. Колышкин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИ «Курчатовский институт»

Рентгеновская монокристаллическая и порошковая дифрактометрия являются основными методами получения атомной и микроструктуры различных материалов, и находят широкое применение для решения задач в различных областях знаний от материаловедения и структурной химии до биологии, геологии и археологии. Станции по структурной кристаллографии присутствуют на всех современных синхротронных источниках и являются чрезвычайно востребованными. Станция «Структурная Кристаллография» на новом источнике синхротронного излучения «СИЛА» позволит существенно расширить диапазон исследуемых материалов и значительно повысить качество получаемых данных, по сравнению с существующими в настоящее время в России установками по монокристаллическим и порошковым дифракционным исследованиям.

Оптическая схема станции обеспечит получение рентгеновского пучка с поперечными размерами от 10 x 10 мкм<sup>2</sup> до 1 x 1 мм<sup>2</sup>. Измерения будут проводиться с использованием монохроматического рентгеновского излучения в широком диапазоне энергий (5–80 кэВ). На станции будет использоваться быстрый двумерный детектор с возможностью изменения его углового положения в широком диапазоне углов рассеяния (0–140°). Планируемое окружение образца будет позволять изучать эволюцию структурных характеристик с изменением температуры (20–1500 К) и давлений газов.

За счет использования нескольких комплементарных методик (монокристаллическая и порошковая рентгеновская дифракция (XRD), резонансная дифракция (REXD), изучение тонкой структуры аномальной дифракции (DAFS), анализ парной радиальной функции распределения (PDF)) в сочетании с уникальными параметрами синхротронного пучка на новом источнике станет возможно решать сложнейшие задачи современной кристаллографии в рамках одной установки:

- изучение структурных особенностей сверхпроводников в режиме *in situ*;
- решение белковых структур методом порошковой дифракции;
- исследование широкого спектра объектов культурного наследия;
- определение структурных особенностей слоистых материалов.

Кроме того, будет возможно проводить исследования быстропротекающих процессов, температурных фазовых переходов широкого спектра материалов за короткое время и многое другое.

# ПРОЕКТ СТАНЦИИ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ (МУР) НА СИНХРОТРОНЕ «СИЛА»

**Ю.А. Гапонов<sup>1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>1</sup>, Г.С. Петерс<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

В проекте описывается рентгеновская станция малоуглового рассеяния (МУР) для нового источника рентгеновского излучения 4-го поколения синхротронно-лазерного комплекса «СИЛА». В проекте были использованы элементы наилучших схемных решений ондуляторных малоугловых станций мирового научно-технического сообщества [1, 2]. Оптическая схема станции спроектирована для работы с ондуляторным излучением ондулятора с периодом  $\lambda_u = 20$  мм, генерирующем ондуляторное излучение в диапазоне энергий излучения  $E_{\text{фот}} \sim 5 \div 20$  кэВ. Благодаря значительному уменьшению размера и угловой расходимости пучка излучения, а также значительному увеличению интенсивности излучения (в том числе когерентной части излучения) в зоне образца ( $I_{\text{фот}} \sim 10^{13} \div 10^{15}$  фот/с) становится возможной реализация не только традиционных методик малоуглового рассеяния (SAXS, BioSAXS), широкоуглового рассеяния (WAXS), дифракции (XRD), но и более сложных в реализации методик ультра-малоуглового рассеяния (USAXS) и рентгеновской фотонной корреляционной спектроскопии (XPCS). Проведение экспериментов с использованием методик SAXS, BioSAXS, USAXS возможно одновременно с методиками WAXS и XRD. Размеры пучка в позиции образца не превышают  $\sigma_{x,z} < 300$  мкм. Максимальный размер исследуемых на станции объектов рассеяния (макромолекул, глобул, коллоидных частиц, кристаллических и аморфных неоднородностей), а также максимальная величина периодичности исследуемых на станции структур составляет  $d_{\text{hkl}} \sim 500$  нм. Наряду с проведением статических исследований на станции МУР становится возможным исследование кинетических и динамических физико-химических процессов с высоким временным разрешением  $\Delta t \sim 1.5$  мс.

[1] T. S. Plivelic, A E. Terry, et al., AIP Conference Proceedings 2054, 030013 (2019).

[2] B. Freelon, K. Sutharb, et al., J. Appl. Cryst. 46, 1508–1512 (2013).

# СТАНЦИЯ «СПЕКТРОСКОПИЯ ПОГЛАЩЕНИЯ»

**А.Л. Тригуб<sup>1</sup>, Е.В. Храмов<sup>1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

Станция «Спектроскопия поглощения рентгеновского излучения» предназначена для определения атомной и электронной структуры материалов методами спектроскопии рентгеновского излучения в энергетическом диапазоне 5–30 КэВ. В качестве источника излучения предполагается использование ондулятора. На станции будут реализованы следующие экспериментальные методы:

- спектроскопия поглощения в режиме пропускания и по выходу флуоресценции (XAS, включая EXAFS и XANES),
- рентгеноэмиссионная спектроскопия (XES),
- спектроскопия поглощения по выходу флуоресценции с высоким энергетическим разрешением (HERFD XAS).

Сочетание XES и XAS-спектрометров в рамках одной экспериментальной установки существенно расширяет спектр исследуемых образцов. Становится возможным измерение протяженных спектров EXAFS для близкорасположенных краев поглощения и отдельное измерение XAS-спектров от металлоцентров с различной степенью окисления, находящихся в составе одного образца. Энергетическое разрешение обычных XANES-спектров также существенно возрастает, что облегчает их количественную интерпретацию [1].

Реализованные на станции методы будут востребованы при решении целого ряда научных задач, в которых требуется определить зарядовое состояние атомов, тип и геометрию локального атомного окружения. Предполагаемые к реализации на станции методы являются универсальными и применимы для широкого класса объектов исследований, независимо от агрегатного состояния и степени упорядочения структуры исследуемых образцов. Особое внимание будет уделено созданию специальных условий на образце (температура, реакционная среда) для исследования механизмов протекания химических реакций.

[1] H. Asakura, T. Tanaka, Chem.Letters 50, 5 (2021).

# ПРОЕКТ СТАНЦИИ «ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ» КОМПЛЕКСА «СИЛА»

**А.М. Лебедев<sup>1</sup>, В.Г. Назин<sup>1</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>1</sup>, В.Г. Станкевич<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

Представлена концепция экспериментальной станции «Электронная спектроскопия» на перспективном источнике синхротронного излучения «СИЛА» [1]. Станция предназначена для спектроскопических исследований электронной структуры твердого тела с использованием излучения вакуумного ультрафиолета и мягкого рентгена. Предполагаемые к реализации методики измерений включают в себя фотоэлектронную спектроскопию (ФЭ), расширенную возможностями по угловому и спиновому разрешению, спектроскопию рентгеновского поглощения, а также неупругое резонансное рассеяние рентгеновского излучения (RIXS). Эти методики являются ключевыми при изучении широкого круга материалов, таких как сверхпроводники, магнитные материалы, катализаторы, интерфейсы, двумерные структуры, сильно коррелированные системы, гибридные материалы. Применение нового источника синхротронного излучения позволит увеличить не только энергетическое разрешение, но и пространственное, перейти к изучению субмикронных и нанометровых объектов.

Станция будет использовать излучение ондулятора на диапазон энергий 50–2000 эВ. Применение монохроматора с дифракционными решетками с переменным шагом штрихов обеспечивает высокую разрешающую силу не менее 10000. Монохроматичное излучение направляется в одну из двух ветвей станции, работающие попеременно, что обеспечивается введением в тракт излучения дополнительного отклоняющего зеркала. Каждая ветвь имеет свою выходную оптическую часть – выходная щель, перефокусирующее зеркало. На одной ветви станции располагается ФЭ спектрометр, на другой – спектрометр RIXS. Каждый спектрометр оснащен сопутствующим набором методик пробоподготовки и характеристики исследуемых образцов.

[1] М.В. Ковальчук, М.М. Борисов, А.А. Гарматина и др. Лазерно-Синхротронный Комплекс НИЦ «Курчатовский Институт» // Кристаллография. – 2022. – Т. 67, №5. – С. 771–784. doi: 10.31857/S0023476122050083

# СТАНЦИЯ ЯДЕРНОГО РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ И СПЕКТРОСКОПИИ НА ПРОЕКТИРУЕМОМ ИСТОЧНИКЕ 4-го ПОКОЛЕНИЯ СИЛА

**А.Г. Куликов<sup>1,2</sup>, Н.И. Снегирёв<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*ФНИЦ Кристаллография и фотоника РАН*

<sup>2</sup>*НИИ Курчатовский институт*

В настоящее время экспериментальные методы исследования материалов, основанные на ядерной гамма-резонансной спектроскопии, широко востребованы и чрезвычайно эффективны для получения уникальной информации о структурных, электронных и магнитных свойствах различных материалов, применяемых в энергетике, микроэлектронике, нанотехнологиях и биомедицине. К этим методам принадлежит мёссбауэровская спектроскопия, которая приобрела особое значение с развитием синхротронных технологий.

Синхротронные методы исследования, основанные на ядерном гамма-резонансе – это уникальный метод исследования структурных и физико-химических свойств материалов и нанообъектов, в том числе в экстремальных условиях высоких давлений, низких и высоких температур, магнитных полей. Важнейшим применением такого метода является исследование новых высоко-энергонасыщенных материалов и сверхпроводников, создаваемых в условиях высоких давлений. В последние годы этот комплекс методов активно реализуется в ведущих мировых синхротронных центрах.

Создание станции ядерного резонансного рассеяния и спектроскопии (ЯРРС) на синхротроне «СИЛА» поднимет на новый уровень отечественные разработки технологии получения новых функциональных материалов, создаваемых в экстремальных условиях высоких давлений и температур, включая высокотемпературные сверхпроводники на основе гидридов. Это может приблизить решение российскими учеными проблемы комнатной сверхпроводимости. Планируется, что фокус исследований на станции ЯРРС будет также направлен на такие актуальные задачи физики, как исследование процессов в недрах Земли, включая подвижность соединений серы и кислорода в магме, геохимический цикл углерода, генезис алмазов, рециркуляция океанической коры и многие другие особенности геофизических процессов. В этой связи синхротронные ядерные методики могут быть использованы для развития природоподобных технологий, решения ряда фундаментальных задач геологии и физического материаловедения.

# СТАНЦИЯ МАГНИТНОГО РАССЕЯНИЯ

О.А. Кондратьев<sup>1</sup>, Р.А. Баулин<sup>1</sup>, Ю.Л. Репченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Станция рентгеновского магнитного рассеяния (X-ray magnetic scattering beamline) нацелена на проведение исследований магнитооптических эффектов в жёстком рентгеновском диапазоне длин волн в наночастицах, кристаллах, порошках, многослойных плёнках и органических объектах, содержащих магнитные атомы с использованием эффектов магнитного кругового и линейного дихроизма в условиях низких или комнатных температур во внешнем магнитном поле в геометрии отражения и прохождения.

Экспериментальная станция позволит элементарно- и орбитально- селективными методами с разделением на спиновые и орбитальные составляющие исследовать фундаментальные характеристики магнитных материалов, такие как величина, направление и распределение по глубине магнитного момента, величина коэрцитивной силы, внешние условия для фазовых магнитных переходов, определение расположения магнитных доменных стенок, определение знака взаимодействия Дзялошинского-Мории, определение абсолютной хиральности (правой или левой энтоморфной модификации) – проблема, которая особо актуальна для фармакологии, использовать эффект магнитного дихроизма для фазоконтрастных методов. Позволит получить необходимую информацию для разработки новых элементов спинтроники и магнетоэлектроники.

На станции планируются к реализации следующие методики: рентгеновский магнитный круговой дихроизм (X-ray Magnetic Circular Dichroism), рентгеновский магнитный линейный дихроизм (X-ray Magnetic Linear Dichroism), рентгеновское магнитное резонансное рассеяние (X-ray Magnetic Resonant Scattering), рентгеновская резонансная магнитная рефлектометрия (X-ray Resonant Magnetic Reflectometry), рентгеновский естественный круговой дихроизм (X-ray Nature Circular Dichroism), рентгеновская магнитная томография (X-ray magnetic tomography), рентгеновская резонансная дифракция (X-ray Resonant Diffraction).

# СТАНЦИЯ ВРЕМЯРАЗРЕШАЮЩЕЙ ДИАГНОСТИКИ СИНХРОТРОННОГО ИСТОЧНИКА «СИЛА»

**А.И. Проценко<sup>1,2</sup>, В.А. Коржов<sup>1,2</sup>, А.В. Таргонский<sup>1,2</sup>,  
А.Е. Благов<sup>1,2</sup>, Я.А. Элиович<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Станция Времяразрешающей диагностики предназначена для исследования неравновесных состояний вещества и динамических процессов во временном масштабе  $10^{-12}$ – $10^2$  секунд, для чего реализован ряд подходов к увеличению временного разрешения рентгеновских методов исследования.

Первый – метод *pump-probe* для реализации методики рентгеновской спектроскопии поглощения (XAS), рентгеновской дифракции (XRD), рентгеновского когерентного имеджинга (XCDF) и прочих. Импульсная структура синхротронного пучка будет обеспечиваться особым режимом работы накопительного кольца и быстрым затвором пучка, импульсное воздействие на исследуемый образец будет проводиться фемтосекундным лазерным источником, а также различными внешними воздействиями за счет модульных систем окружения образца. Подобная схема используется на таких синхротронных станциях, как ID15A (ESRF), MS (SESAME),  $\mu$ -XRD (TPS) и в целом широко распространена. Детектор с пространственным разрешением позволяет за один кадр получать результат измерения при исследовании в методиках рентгеновской дифрактометрии (XRD), рефлектометрии (XRR), рентгеновского широкоугольного рассеяния (WAXS) и рентгеновской топографии (CT).

Второй подход к реализации временного разрешения рентгеновских методик исследования – применение быстрого монохроматора, позволяющего модулировать энергию монохроматического пучка в определенном диапазоне с высокой частотой. Быстрые монохроматоры применяются на синхротронных станциях: TPS 44A (TPS), I20 (DLS), ROCK (SOLEIL) и ряде других.

Разнообразие применяемых модулей окружения образца позволит проводить *in-situ* исследования широкого круга динамических процессов и неравновесных состояний вещества с высоким временным разрешением.

[1] G.B.M. Vaughan, R. Baker, R. Barret, et al., J. Synchrotron Rad. 27, 515–528 (2020).

[2] C.-W. Pao, J.-L. Chen, J.-F. Lee, et al., J. Synchrotron Rad. 28, 930-938 (2021).

## СЕКЦИЯ 2.2

### **Концептуальные проекты и научные программы экспериментальных станций первой очереди лазера на свободных электронах**

Председатели: *Благов А.Е. и Носик В.Л.*

## РАЗРАБОТКА СТАНЦИИ ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ ДЛЯ ПРОЕКТА «СИЛА»

**С.С. Макаров<sup>1,2</sup>, К.Ф. Бурдонов<sup>1,3</sup>, А.В. Лобанов<sup>1,4</sup>, В.В. Кравченко<sup>1,4</sup>,  
Г.С. Лагодич<sup>1,4</sup>, А.А. Набокова<sup>1,4</sup>, С.А. Пикюз<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

<sup>3</sup>Институт прикладной физики имени А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук

<sup>4</sup>Институт лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ

Стремительное развитие лазерных технологий в направлении создания мощных лазерных комплексов во всем мире позволило генерировать в лабораторных условиях и исследовать плазму чрезвычайно высокой температуры и плотности. Соответствующая область исследований – наука о высокой плотности энергии (high energy density science, HEDS) – является новой всеобъемлющей отраслью физики, которая может произвести революцию в различных направлениях традиционной науки и техники, включая астрофизику, ускорение частиц, термоядерный синтез и свойства конденсированных сред в экстремальных условиях. HEDS тесно связана с физикой плазмы и конденсированного состояния; релятивистской физикой; физикой лазеров и пучков заряженных частиц; ядерной, атомной и молекулярной физикой; астрофизикой и т.п.

Станция «Вещество в экстремальном состоянии (ВЭКС)» разрабатывается в рамках проекта «СИЛА» как одна из станций первой очереди рентгеновского лазера на свободных электронах (РЛСЭ). Традиционно принято считать, что вещество находится в состоянии «высокой плотности энергии» при плотности энергии выше  $10^{11}$  Дж/м<sup>3</sup>, которая эквивалентна давлению 1 Мбар (0.1 ТПа) или магнитному давлению в 500 Т. Такое состояние вещества может быть создано в лабораторных условиях при воздействии оптического лазерного излучения высокой и сверхвысокой пиковой мощности на материальные мишени. Объединение в лабораторном эксперименте РЛСЭ с источником мощного оптического излучения открывает широчайшие возможности для исследования вещества, находящегося в экстремальном состоянии.

В рамках нашего доклада рассматривается научная программа станции ВЭКС, а также актуальный статус разработки мишенного и лазерного залов данной станции.

# КОНЦЕПТУАЛЬНЫЙ ПРОЕКТ И НАУЧНАЯ ПРОГРАММА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СТАНЦИИ РЛСЭ «КОГЕРЕНТНАЯ ДИФРАКЦИОННАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ (КДВ)»

**М.С. Фоломешкин<sup>1,2</sup>, П.А. Просеков<sup>1,2</sup>, А.Ю. Серегин<sup>1,2</sup>, В. Г. Кон<sup>1,2</sup>,  
А.Г. Куликов<sup>1,2</sup>, Ю.А. Волковский<sup>1,2</sup>, А.В. Таргонский<sup>1,2</sup>, Ю.В. Писаревский<sup>1,2</sup>,  
А.Е. Благов<sup>1,2</sup>, М.В. Ковальчук<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Сегодня активное строительство по всему миру рентгеновских лазеров на свободных электронах (РЛСЭ) открывает беспрецедентные возможности для исследования структурной динамики вещества и развития многих областей фундаментальной и прикладной науки [1]. Строительство отечественного РЛСЭ в рамках проекта «СИЛА» [2] будет способствовать развитию в России целого ряда областей науки и промышленности, среди которых можно выделить биологию, медицинские технологии, фармакологию, генетику, нано- и нанобиотехнологии, микроэлектронику, прикладное материаловедение, природоподобные технологии.

Экспериментальная станция «Когерентная дифракционная визуализация» (КДВ) разрабатывается в рамках проекта «СИЛА» как одна из станций первой очереди РЛСЭ. На станции будут решаться основные задачи структурной биологии и материаловедения по изучению и визуализации структуры органических и неорганических упорядоченных, слабоупорядоченных и неупорядоченных микро- и нанообъектов с нанометровым пространственным и фемтосекундным временным разрешением.

В докладе представлен концептуальный проект станции КДВ. Приведен краткий обзор основных научных направлений и методов исследований, реализация которых планируется на станции. Представлена оптическая схема станции и рассмотрены ее основные элементы с учетом специфики решаемых научных задач и реализуемых методов исследования.

[1] E.A. Seddon, J.A. Clarke, D.J. Dunning et al. // Rep. Prog. Phys. 80 (2017).

[2] М.В. Ковальчук, А.Е. Благов, О.С. Нарайкин и др. // Кристаллография. 67, 5 (2022).

# КОНЦЕПТУАЛЬНЫЙ ПРОЕКТ И НАУЧНАЯ ПРОГРАММА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СТАНЦИИ ЛСЭ «ВРЕМЯРАЗРЕШАЮЩИЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ (ВРЭ)»

**Ф.С. Пиляк<sup>1,2</sup>, А.Г. Куликов<sup>1,2</sup>, В.И. Аккуратов<sup>1,2</sup>, М.С. Фоломешкин<sup>1,2</sup>,  
А.Ю. Серегин<sup>1,2</sup>, П.А. Просеков<sup>1,2</sup>, А.В. Таргонский<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Рентгеновские лазеры на свободных электронах (РЛСЭ) обладают выдающимися характеристиками пучка (яркость, степень когерентности, временная структура), что позволяет реализовывать времяразрешающие эксперименты для исследования процессов на уровне взаимодействия отдельных атомов.

Экспериментальная станция первой очереди РЛСЭ проекта «СИЛА» – станция «Времяразрешающих рентгеновских экспериментов» (ВРЭ) – предназначена для проведения высокоточных исследований динамики физических процессов, наблюдаемых в условиях внешних воздействий. Оснащение станции специализированными системами окружения образца обеспечивает возможность проведения эксперимента в условиях внешних электрических и магнитных полей, лазерного излучения, температурных воздействий и высокого давления. За счет применения различных систем управления временными характеристиками излучения, такими как линии задержки электронного и рентгеновского пучков, фемтосекундного лазера и системы высокоточной синхронизации оборудования, целевой временной диапазон регистрации данных составляет от нано- до аттосекунд.

Научные направления станции ВРЭ включают в себя исследования как обратимых, так и необратимых процессов, среди которых можно выделить лазерно-индуцированные фазовые переходы, динамику формирования сверхплотной плазмы, поведение материалов при нагреве вблизи точки фазового перехода, фотоиндуцированные деформационные процессы, исследование динамики и особенностей инжекции носителей заряда и процесса зарядопереноса, преобразование энергии оптического излучения фотокаталитическими материалами, электроиндуцированные процессы перестройки реальной структуры кристаллов, процессы изменения конфигурации электрических и магнитных доменов, а также поведение структуры кристаллических материалов в условиях динамической нагрузки.

В докладе представлен предварительный обзор основных задач и планируемых экспериментальных методик станции ВРЭ. Представлена оптическая схема станции, включающая ее основные узлы, линию разделения и задержки, а также некоторые варианты окружения образца для реализации экспериментов в условиях внешних воздействий.

# ПРОЕКТ СТАНЦИИ «ЭЛЕКТРОННАЯ ДИНАМИКА» НА ЛАЗЕРЕ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ «СИЛА»

**Р.Г. Чумаков<sup>1</sup>, А.А. Андреев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

Использование излучения лазера на свободных электронах в диапазоне энергий фотонов от вакуумного ультрафиолета до мягкого рентгена позволяет использовать фотоэлектронную, рентгеновскую и ионную спектроскопию для исследования динамики электронной структуры в атомах и молекулах, динамики протекания химических реакций и каталитических процессов, движения электронных состояний в квантовых материалах, на поверхности и в интерфейсах.

Проект станции «Электронная спектроскопия и динамика» лазера на свободных электронах «СИЛА» [1] разработан с целью решения актуальных задач современной физики времяразрешающими методами, такими как: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (TR-XPS), спектроскопия рентгеновского поглощения (TR-XPS), неупругое рассеяние рентгеновских лучей (TR-RIXS, TR-REXS), реакционная микроскопия (REMI). При этом реализация данных методических возможностей является сложной научно-технической задачей, включающей расчет, разработку и прототипирование большого числа передового инженерного и научного оборудования.

В работе представлена научная программа экспериментальной станции, параметры излучения лазера на свободных электронах, оптическая схема и технические предложения для реализации заявленных экспериментальных методик.

[1] М.В. Ковальчук, М.М. Борисов, А.А. Гарматина и др. Лазерно-Синхротронный Комплекс НИЦ «Курчатовский Институт» // Кристаллография. – 2022. – Т. 67, №5. – С. 771–784. DOI: 10.31857/S0023476122050083.

## МИКРОСИМПОЗИУМ 1

### **Разработка научной программы развития нейтронных исследований в Российской Федерации**

Модераторы: *Благов А.Е., Белушкин А.В.*

# СОСТОЯНИЕ РАБОТ ПО СОЗДАНИЮ НЕЙТРОННЫХ УСТАНОВОК ДЛЯ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ НА РЕАКТОРНОМ КОМПЛЕКСЕ ПИК

**В.В. Тарнавич<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>НИИЦ Курчатовский институт – ПИЯФ*

Один из ключевых элементов программы по развитию синхротронных и нейтронных исследований и инфраструктуры в Российской Федерации, высокопоточный реактор ПИК станет уникальной базой научных исследований, проводимых с использованием нейтронов (фундаментальные свойства нейтрона, материаловедение, физика и техника реакторов, ядерная физика, нейтронная физика, физика конденсированного состояния).

Работы по оснащению реактора ПИК комплексом современного оборудования осуществляются в рамках проекта: «Создание приборной базы реакторного комплекса ПИК» (сроки выполнения 2019–2024 гг.). В рамках проекта, в том числе, создается тринадцать современных нейтронных установок для решения задач по физике конденсированного состояния. В комплекс установок по физике конденсированного состояния также войдут пять исследовательских нейтронных установок, введённых в эксплуатацию в декабре 2020 г. Экспериментальные работы на данных установках проводились на этапе перехода реактора ПИК на энергетический режим работы, предполагающий выход на тепловую мощность 10 МВт.

# НАУЧНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ В ОБЛАСТИ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ НА РК ПИК

И.А. Зобкало<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

В докладе рассматриваются перспективы научных исследований в области физики конденсированного состояния на экспериментальном комплексе РК ПИК в следующих направлениях:

1. Квантовые технологии. Уникальная способность нейтронных методов исследовать квантовую запутанность, ведущая роль в открытии экзотических фаз материи, таких как спиновые жидкости и магнитные монополи в твердых телах, что потенциально может привести к разработке новых квантовых материалов.

2. Электроника и информационные технологии. Будущее информационных технологий является квантовым. Нейтроны станут ключом к открытию новых материалов и пониманию их поведения, а также дальнейшего развития, разработки ИТ-решений следующего поколения.

3. Энергоэффективность, энергосбережение. Нейтроны вносят значительный вклад в развитие устойчивой экономики энергии за счет изучения новых материалов и технологии. Примеры включают в себя безопасные системы хранения водорода следующего поколения, батареи и улучшенные материалы для атомной, солнечной и ветряной энергетики.

4. Медицина и здравоохранение, науки о жизни. Чувствительность нейтронов к биологически важным атомам водорода, вместе с мощным селективным методом дейтериевого контраста, позволяет осуществлять значительные продвижения в широком диапазоне, связанном с здравоохранением, включая рак и нейродегенеративные заболевания.

# ИССЛЕДОВАНИЯ В НЕЙТРОННОМ МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКОМ КОМПЛЕКСЕ ИФМ УРО РАН

**А.Ф. Губкин<sup>1,2,3</sup>, В.И. Бобровский<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН*

<sup>2</sup>*АО «Институт реакторных материалов» ГК Росатом*

<sup>3</sup>*Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет*

Нейтронный материаловедческий комплекс (НМК) ИФМ УрО РАН функционирует на правах арендатора на исследовательском реакторе ИВВ-2М, принадлежащем АО «Институт реакторных материалов» Госкорпорации Росатом. В настоящий момент НМК ИФМ располагает тремя нейтронными дифрактометрами на 2 горизонтальных каналах. Имеется также возможность проводить облучение образцов потоками быстрых нейтронов в вертикальном мокром канале реактора. НМК ИФМ является единственным центром в России, где проводятся нейтронографические исследования высокоактивных материалов, в том числе, и после реальной эксплуатации в реакторах БАЭС.

Основными направлениями исследований НМК являются:

Радиационная физика (изучение явлений, вызванных облучением материалов быстрыми нейтронами). В последние годы НМК ИФМ ведутся работы по изучению радиационно-стимулированных эффектов и механизмов их возникновения в реакторных конструкционных сталях, в сплавах с памятью формы, в некоторых модельных материалах. Значительную роль в этих работах играют нейтронно-дифракционные исследования, являющиеся основным инструментом изучения структурного и микроструктурного состояния материалов и их изменений в процессе нейтронного облучения.

Физика конденсированного состояния (изучаются кристаллические и магнитные структуры различных материалов, фазовые переходы, диаграммы состояния, фазовый состав материалов, микроструктура, развиваются методы анализа данных нейтронных экспериментов). В последние годы исследовались системы с конкурирующими магнитными взаимодействиями, мультиферроики, материалы с ионной проводимостью для инновационной энергетики, различные полупроводники.

Основным источником финансирования НМК ИФМ является государственное задание МИНОБР-НАУКИ России (тема «ПОТОК №122021000031-8»).

## УСКОРИТЕЛЬНЫЙ ИСТОЧНИК НЕЙТРОНОВ VITA ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

**М.И. Бикчурина, Т.А. Быков, Г.Д. Верховод, И.С. Ибрагим, А.И. Касатова,  
Д.А. Касатов, Я.А. Колесников, В.Д. Коновалова, А.М. Кошкарев, А.С. Кузнецов,  
К.С. Кузьмина, Г.М. Остринов, В.В. Поросев, С.С. Савинов, Н.Ш. Сингатулина,  
Е.О. Соколова, И.Н. Сорокин, Т.В. Сычева, С.Ю. Таскаев, Ю.С. Таскаева,  
А.А. Шуклина, И.М. Щудло, С.В. Щукин**

*Институт ядерной физики СО РАН  
Новосибирский государственный университет*

В Институте ядерной физики СО РАН функционирует ускорительный источник нейтронов VITA, состоящий из ускорителя-тандема с вакуумной изоляцией для получения моноэнергетического пучка протонов или дейтронов с энергией от 0,3 до 2,3 МэВ с током до 10 мА, литиевой мишени для генерации нейтронов и ряда систем формирования пучка нейтронов для получения пучка нейтронов в широком диапазоне энергий: холодных, тепловых, эпитепловых и быстрых. VITA используют для бор-нейтронозахватной терапии, включая лечение, развитие методов дозиметрии, тестирования препаратов адресной доставки бора, а также для радиационного тестирования перспективных материалов и оборудования, измерения сечения ядерных реакций, изучения нейтрон-индуцированной флюоресценции, разработки нейтронного дифрактометра и ряда других приложений. В докладе представлено описание ускорительного источника нейтронов VITA, приведены его характеристики и представлены результаты проведенных исследований. Отдельное внимание будет обращено к концепции компактного мощного источника быстрых нейтронов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-72 30005), <https://rscf.ru/project/19-72-30005>.

## СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

# ВОЗМОЖНОСТИ НЕЙТРОННОГО ДИФРАКТОМЕТРА ДИСК

С.С. Агафонов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Метод, основанный на упругом рассеянии нейтронов, имеет существенные преимущества перед рентгеновским: является изотропным; даёт возможность локализовать легкие атомы (углерод, кислород, водород) в матрице тяжелых [1]; позволяет различить элементы, близко расположенные в периодической системе. Кроме того, взаимодействие между магнитным моментом нейтрона и магнитными моментами атомов даёт возможность получать информацию о магнитной структуре кристаллов [2].

Дифрактометр ДИСК установлен на шестом горизонтальном экспериментальном канале (ГЭК 6) реактора ИР-8. На станции реализован метод дифракции нейтронов для исследования атомной и магнитной структур порошковых материалов. Главной особенностью дифрактометра является высокая светосила, достигаемая с помощью регистрирующей системы из 224 сцинтиляционных счетчиков и суперпозиционного метода регистрации.

Установка располагает следующими приспособлениями для окружения образца:

- малый криостат замкнутого цикла для проведения работ по изучению структуры и фазовых превращений методом дифракции нейтронов в порошковых образцах при температурах 3-300 К.
- шахтный криостат на основе криокулера замкнутого цикла на импульсных трубках SUMITOMO SRP-062B с вертикальной загрузкой. Предназначен для исследования образцов при давлении до 2 ГПа, получаемом при помощи камер высокого давления с сапфировыми или алмазными наковальнями, в диапазоне температур 6–300 К.
- вакуумная печь для изучения структуры и фазовых превращений в порошковых материалах при температурах от 300 до 1000 К.

[1] S.A. Lushnikov, E.A. Movlaev, V.N. Verbetsky, V.A. Somenkov, S.S. Agafonov. Interaction of ZrMo<sub>2</sub> with hydrogen at high pressure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(35), 22330–22332.

[2] O.N. Lis, D.P. Kozlenko, A.V. Belushkin, V.P. Glazkov, P.A. Borisova, E.V. Dyuzheva-Maltseva. High pressure effects on the crystal and magnetic structure of ScMnO<sub>3</sub>. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Volume 563, 1 December 2022, 169916.

# ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МИКРОСТРУКТУРЫ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ ПРИ ВАРИАЦИЯХ ЭЛЕМЕНТОВ ЛЕГИРОВАНИЯ

О.В. Акимова<sup>1</sup>, Е.С. Куликова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

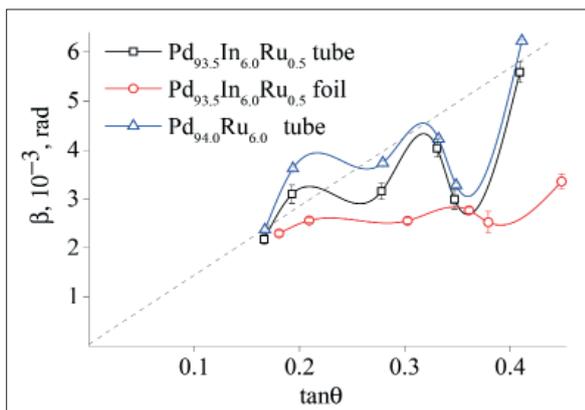


Рис. 1. Сравнение дифракционного уширения отражений в зависимости от химического сорта элемента легирования палладия. Числовые индексы у элементов показывают массовые проценты

Добавление легирующих элементов к палладию проводится с целью эффективного улучшения эксплуатационных свойств металлических систем, востребованных в технологических процессах водородной энергетики, микроэлектронике и контактной индустрии [1–3]. Особенности микроструктуры сплавов уделяется повышенное внимание с целью инновационного развития возможностей вариативного изменения структуро-чувствительных свойств палладиевых сплавов, а именно их прочности, пластичности и водородо-проницаемости [2, 4]. В области задачи выявления закономерностей влияния элементов легирования палладия (в наших работах Y, Pb, In, Ru [5, 6]) метод рентгеновской дифракции с использованием синхротронного излучения является мощным инструментом, обеспечивающим высокую точность проводимых исследований.

На рис. 1 показаны изменения дифракционного уширения отражений ( $\beta$ ) от областей когерентного рассеяния с индексами Миллера 100,110,331 и 111 в зависимости от тангенса угла дифракции ( $\tan\theta$ ) и сорта элемента легирования палладия. Известно, что величина ( $\beta$ ) информирует о таких параметрах субструктуры сплавов, как эффективные размеры ОКР(hkl) и микродеформации в кристаллитах ( $\epsilon$ ).

Проводимые нами исследования выявляют взаимосвязь параметров микроструктуры сплавов с условиями изготовления мембранных фильтров, что является звеном в цепочке сложного процесса формирования возможностей развития технологий нового поколения.

[1] M.R. Rahimpour, F. Samimi et al., J. Chem. & Procc. : Process Intensif. 121, 24 (2017). <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2017.07.021>.

[2] G.S. Burkhanov, N.B. Gorina et al., Platinum Metals Rev. 55, 3 (2011).

[3] J.B. Sharma, J.-S. Kim, Int. J. Hydrogen Energy. 42, 2544 (2017) <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.08.142>.

[4] S.V. Gorbunov, S.V. Kannykin et al., Russian Metallurgy (Metally). 1, 54 (2017). <http://dx.doi.org/10.1134/S0036029517010050>.

[5] О.В. Акимова, Ю.А. Овченкова и др. ВМУ. Сер. 3, 5, 91 (2022).

[6] O.V. Akimova, R.D. Svetogorov et al. Membranes. 12, 1132 (2022) <https://doi.org/10.3390/membranes12111132>.

# РОЛЬ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$ ) С РАЗНЫМИ ФОРМАЛЬНЫМИ ЗАРЯДАМИ В ФОРМИРОВАНИИ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ МВТС

**И.Д. Акинъшин<sup>1</sup>, Г.М. Кузьмичева<sup>1</sup>, Р.Д. Светогоров<sup>2</sup>, Е.В. Храмов<sup>2</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «МИРЭА-Российский технологический университет»

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Металл-органические полимеры (MOF, Metal-Organic Framework) – класс соединений, к которым неуклонно растет внимание исследователей из-за практически неограниченных возможностей структурного дизайна, а, значит, и широкого спектра функциональных свойств. На состав и строение MOF существенное влияние оказывают метод и условия получения, включая комбинацию исходных компонентов: прекурсоров и растворителей. В данной работе представлены результаты изучения методами рентгенографии, рентгеновской абсорбционной и электронной спектроскопии состава (объема и поверхности) и структуры (кристаллической и локальной) MOF МВТС ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$ ) на основе бензол-1,3,5-трикарбоновой кислоты ( $\text{H}_3\text{BTC}$ ), синтезированных гидротермальным методом при одних и тех же условиях процесса. Цель работы – установление своеобразия структурного поведения ионов переходных металлов при образовании фаз МВТС.

Использование  $M^{2+}\text{Cl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  в качестве источника ионов  $M$  приводит к реализации MOF с разными типами структур – HKUST-1 (Cu), МВТС с пр.гр. P3 ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}$ ) и пр.гр. C2 ( $M = \text{Zn}$ ); в образце присутствует примесная фаза, что обусловлено разными формальными зарядами (ФЗ) ионов  $M$ :  $\text{Cu}^{2+}$  (ян-теллеровский ион),  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{(3,2)+}$  (с большим содержанием ян-теллеровских ионов  $\text{Mn}^{3+}$ ),  $\text{Co}^{(3,2)+}$ ,  $\text{Ni}^{(3,2)+}$ . В зависимости от ФЗ  $M$  и их электронного строения в структурах МВТС присутствуют вытянутые ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}$ ; в большей степени с Mn) и сжатый (Zn) октаэдры,  $\text{Cu}^{2+}$  - вытянутый полуквадрат. На примере CuBTC показаны особенности дифракционной картины, вызванные составами каркаса и пустот в каркасе, что совместно с параметрами ячейки позволяет контролировать миграцию «гостевых» молекул [1]. Обсуждены понятия классической и топологической кристаллохимии в применении к металл-органическим полимерам.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов на выполнение проектов Министерства науки и высшего образования РФ №0706-2020-0026.

[1] A.A. Gainanova, G. M. Kuz'micheva, et al., J. Mater. Sci. 57, 24 (2022).

# СТРОЕНИЕ ВЫСОКОПРЕЛОМЛЯЮЩИХ ОКСИДНЫХ СТЕКОЛ ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ EXAFS И XANES

**Р.О. Алексеев<sup>1</sup>, Л.А. Авакян<sup>2</sup>, Г.Ю. Шахгильдян<sup>1</sup>, Г.Б. Сухарина<sup>2</sup>, А.М. Ермакова<sup>2</sup>,  
В.И. Савинков<sup>1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>3</sup>, Л.А. Бугаев<sup>2</sup>, В.Н. Сигаев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева*

<sup>2</sup>*Южный федеральный университет*

<sup>3</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

Применение методов EXAFS и XANES к оксидным стеклам и ситаллам весьма перспективно для изучения локального окружения вблизи «тяжелых» атомов и оценки степени его влияния на стеклообразующую и кристаллизационную способность. Мы продемонстрировали это на примере системы  $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5\text{-B}_2\text{O}_3$  (LBN), в которой были получены стекла с высоким показателем преломления от 1,7 до 2,0. Основу структуры ближнего порядка LBN стекол по данным ИК и спектроскопии EXAFS и XANES составляют группировки  $\text{VO}_3$ ,  $\text{VO}_4$ ,  $\text{NbO}_6$  и  $\text{LaOn}$  ( $n = 6\text{-}10$ ). Изменение концентрации оксида ниобия не влияет на локальную структуру вблизи атомов ниобия, сохраняя при этом его октаэдрическую координацию по кислороду со средним расстоянием Nb–O 1,87 Å. Во второй координационной сфере наблюдается слабое взаимодействие, которое относится к вершинным связям Nb–O–Nb со средними расстояниями 3,73 Å. Ниобиевые октаэдры соединяются преимущественно по вершинам. Вблизи атомов лантана структура заметно изменяется по мере увеличения доли оксида ниобия, а именно среднее расстояние La–O увеличивается на ~0,03 Å, а координационное число атомов лантана по кислороду возрастает от 6,8 до 10. Такое строение ближнего порядка обеспечивает достаточно высокую стеклообразующую способность для составов с высоким содержанием  $\text{La}_2\text{O}_3$  и  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  [1].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (соглашение №19-19-00613-П).

[1] R.O. Alekseev et al. Local Atomic Structure of the High Refractive Index  $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5\text{-B}_2\text{O}_3$  Glasses // Journal of Alloys and Compounds. 2022. P. 165357.

## МАКЕТ ДИАГНОСТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ОНДУЛЯТОРА С ПЕРИОДОМ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ 27 мм

**А.А. Амиров<sup>1</sup>, Я.М. Абакумов<sup>1</sup>, Н.В. Смоляков<sup>1</sup>, Д.О. Самсонов<sup>1</sup>,  
М.А. Колющенко<sup>1</sup>, А.С. Комлев<sup>1</sup>, Е.Н. Индюшный<sup>1</sup>, А.В. Самарин<sup>1</sup>,  
А.В. Таргонский<sup>1</sup>, М.Ю. Пресняков<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»*

Рассчитана магнитная структура и определены основные конструкционные решения ондулятора с периодом 27 мм. Для проверки полученных результатов расчетов и корректности выбора технических решений разработаны однопериодный макет диагностической системы ондулятора (тип U27) и измерительная система на основе датчиков Холла, адаптированная под разработанную конструкцию. Отличительной особенностью разработанного макета ондулятора является клиновидная механическая система, позволяющая проводить тонкую настройку положения отдельных магнитных элементов, в том числе и с использованием роботизированных систем автоматизации. Конструкция макета позволяет проводить модернизацию ондуляторной сборки, в том числе и увеличение количества периодов. Основными задачами работы с макетом диагностической системы являются:

- определение пространственного распределения величины магнитной индукции (картирования магнитного поля ( $B_x$ ,  $B_y$ ,  $B_z$ ) постоянных магнитов и их систем, входящих в состав ондуляторных систем;
- определение интегральных характеристик магнитного поля ондуляторных систем (первый и второй интегралы магнитного поля) из результатов измерений пространственного распределения величины магнитной индукции.

Будут представлены результаты предварительных измерений магнитных параметров одного периода ондулятора и испытаний механической системы юстировки магнитной сборки.

# АДСОРБЦИЯ ДИПОЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ $C_{60}F_{18}$ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ

**А.А. Андреев<sup>1</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИ «Курчатовский институт»

В последние годы органические материалы всё чаще используются в молекулярной электронике. Особое внимание уделяется фуллеренам и их производным, а именно фторидам фуллерена, которые нашли применение в создании электроактивных элементов в солнечных батареях [1], слоях в тонкоплёночном органическом транзисторе [2], а также для создания органических светоизлучающих диодов Шоттки [3]. Фторид фуллерена  $C_{60}F_{18}$  обладают собственным электрическим дипольным моментом, что стало предметом перспективных исследований [4, 5]. В данных работах проводилось исследование адсорбции  $C_{60}F_{18}$  на поверхностях Cu(001), Au(111) и Ni(100). Поведение данных молекул на диэлектриках поверхностях все ещё остается актуальной задачей для применения в реальных элементах микроэлектроники.

Методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на станции «НаноФЭС» [6] было проведено исследование фундаментальных физико-химических явлений, происходящих при адсорбции дипольных молекул фторида фуллерена  $C_{60}F_{18}$  на диэлектрических поверхностях оксида кремния  $SiO_2/Si(001)$  и германия  $GeO_2/Ge(111)$ . Создание образцов тонких пленок молекул  $C_{60}F_{18}$  проводилось методом молекулярно-пучковой эпитаксии в сверхвысоковакуумных условиях.

В ходе выполнения данной работы были определены типы адсорбции дипольных молекул и характер их самоорганизации на поверхностях в зависимости от материала подложки. Полученные данные могут оказаться полезными для создания элементов молекулярной электроники.

[1] Haddon R.C., Perel A.S., Morris R.C. et al. // Appl.Phys. Lett. 1995. 67, №1. P. 121.

[2] Kobozono Y., Nagano T., Naruyama Y. et al. // Appl.Phys. Lett. 2005. 87, №14. P. 143506.

[3] Pahner P., Kleemann H., Burtone L. et al. // Phys.Rev. B. 2013. 88, Iss. 19. 195205.

[4] A.I. Oreshkin et al., «Real-time decay of fluorinated fullerene molecules on Cu(001) surface controlled by initial coverage», Nano Res., pp. 1–14, Sep. 2017.

[5] Bairagi K. et al. STM study of  $C_{60}F_{18}$  high dipole moment molecules on Au (111) // Surface Science. – 2015. – Т. 641. – С. 248–251.

[6] А.М. Лебедев, К.А. Меньшиков, В.Г. Назин, В.Г. Станкевич, М.Б. Цетлин, Р.Г. Чумаков, Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования, 2021, 10, 44.

# ОСОБЕННОСТИ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ НИКЕЛЯ И ТИТАНА В КРИСТАЛЛАХ $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ , ДОПИРОВАННЫХ ОКСИДОМ ТИТАНА (IV) В ВИДЕ НАНОЧАСТИЦ И ЗОЛЕЙ

**Л.А. Арбанас<sup>1</sup>, Г.М. Кузьмичева<sup>1</sup>, Е.В. Храмов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*МИРЭА – Российский технологический университет*

<sup>2</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

Кристаллы  $\alpha\text{-NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (NSH) обладают высокой пропускающей способностью в ультрафиолетовом диапазоне 230–330 нм, что делает их перспективным для УФ-фильтров [1]. Допирование NSH оксидами титана (IV) может улучшить функциональные свойства кристаллов или проявить новые. Для понимания природы свойств с дальнейшим управлением ими необходимо знание локального окружения ионов никеля и титана. Это и явилось мотивацией данного исследования.

Объекты исследования: NSH и NSH:Ti – допированные наночастицами коммерческих образцов (Hombifine N – анатаз, Degussa P25 – 85% рутил+15% анатаз) и синтезированных нами ( $\eta$ -фаза состава  $\text{TiO}_{2-x} \cdot m\text{H}_2\text{O}$ -ET), а также золями.

Изучение образцов методом XAS проведено на станции СТМ КИСИ. Спектры К-краев Ni и Ti регистрировали в режиме пропускания и флуоресценции, первичная обработка которых проведена с помощью программного пакета IFEFFIT [2]. Фурье-трансформанты нормированной EXAFS-функции проанализированы в диапазоне  $k = 2\text{--}12 \text{ \AA}^{-1}$  (К-край Ni) и  $k = 2\text{--}7 \text{ \AA}^{-1}$  (К-край Ti). Найдено, что координация  $\text{Ni}^{2+}$  одинакова для всех образцов (слегка сжатый октаэдр: КЧ Ni = 2+4), за исключением NSH:Ti(ET), в структуре которого правильный октаэдр (КЧ Ni = 6) со значительно меньшим расстоянием до  $\text{H}^{1+}$  (вторая координационная сфера). Спектр XANES кристалла NSH:Ti(ET) идентичен спектру рутила с КЧ Ti = 4 + 2. Нами впервые зафиксирован эффект кристаллизации в межблочном пространстве NSH практически аморфной  $\eta$ -фазы (сверхструктура к анатазу) в виде рутила, минуя стадию образования анатаза.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования (проект №075-15-2021-1362).

[1] V.L. Manomenova, E.B. Rudneva, A.E.J. Voloshin. Russian Chemical Reviews. 85(6), 585–609. (2016).

[2] B. Ravel, M. Newville, J. Synchrotron Rad, ATHENA, ARTEMIS, HEPHAESTUS: data analysis for X-ray absorption spectroscopy using IFEFFIT, 12, 537–541 (2005).

# ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩИЙ ДЕТЕКТОР ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**А.Л. Астафьев<sup>1</sup>, М.А. Воеводина<sup>1</sup>, Д.А. Зверев<sup>1</sup>, А.А. Снигирев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*МНИЦ Когерентная рентгеновская оптика,  
Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта*

Наиболее широко используемым методом визуализации рентгеновских лучей является получение рентгеновских изображений с использованием цифровых камер и сцинтиллятора, также известного, как непрямой метод визуализации [1]. Этот метод основан на преобразовании рентгеновского излучения сцинтиллятором в фотоны видимого света. Затем, с помощью оптической системы, свет передается на сенсор цифровой камеры.

В данном докладе представлен компактный 2-D рентгеновский детектор, основанный на монохромном CMOS-сенсоре с разрешением 20 Мп. Детектор имеет скорость съемки до 19 кадров в секунду при полном разрешении 5496x3672 пикселя. В качестве сцинтиллятора используется кристалл LuAG:Ce толщиной 20  $\mu\text{m}$ , обладающий высокой квантовой эффективностью. Поле зрения детектора составляет 4.7 x 3.2 мм, соответствующее эффективному размеру пикселя 0.8  $\mu\text{m}$ , при размере пикселя матрицы 2.4  $\mu\text{m}$ .

Эксперимент по проверке эффективности детектора был проведен с использованием лабораторного источника Excillium MetalJet D2 с жидким GaIn анодом. В качестве объектов тестирования использовалась металлическая сетка с периодом 25.4  $\mu\text{m}$  и Siemen Star). Дополнительно, были получены рентгеновские изображения биологических образцов (оса и многоножка).

В результате измерений установлено, что рентгеновский детектор обладает разрешением менее 3  $\mu\text{m}$ , малыми линейными искажениями на уровне 1% или менее. Такие параметры обеспечивают получение качественных и детализированных рентгеновских изображений, и позволяют использовать детектор в рентгеновском имиджинге, топографии, микроскопии и высокоразрешающей дифрактометрии, а также, для интроскопии на станции СИ, для диагностики пучка и приборов и юстировки образцов.

[1] A. Koch, C. Raven, P. Spanne, A. Snigirev, J.Opt.Soc.Am.A., 1998, p. 1940–1951.

# ЛАБОРАТОРНЫЙ ИСПЫТАТЕЛЬНЫЙ СТЕНД ДЛЯ ТЕСТИРОВАНИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ И ПОДГОТОВКИ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

**А.А. Баранников<sup>1</sup>, Д.А. Зверев<sup>1</sup>, И.И. Лягун<sup>1</sup>, И.Б. Панормов<sup>1</sup>, А.А. Снигирев<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта*

В настоящей работе представлен лабораторный комплекс «SynchrotronLike», разработанный для тестирования рентгеновской оптики и подготовки к синхротронным исследованиям [1]. Комплекс позволяет экономить время и ресурсы, затрачиваемые на проведение экспериментов на источниках синхротронного излучения. Несмотря на исключительные возможности в исследовании окружающего мира «Мегасайенс»-установками, их доступность для пользователей весьма ограничена.

Лабораторное оборудование, входящее в состав комплекса «SynchrotronLike», более доступно и может использоваться практически без ограничений по времени. Кроме того, оно обеспечивает высокую универсальность установки, что позволяет решать широкий спектр задач, не требующих высокого временного и энергетического разрешения. Сюда входят такие методы как фазовоконтрастная проекционная микроскопия и томография, микроскопия с использованием преломляющих линз, малоугловая рентгеновская дифракция, а также рентгеновская топография с высоким пространственным разрешением. Кроме того, комплекс активно используется для тестирования оптики, изготавливаемой для новых российских синхротронов 4-го поколения и комптоновских рентгеновских источников, а именно преломляющих рентгеновских линз, трансфокаторов и алмазной оптики.

Основным элементом комплекса является микрофокусный рентгеновский источник Excillum MetalJet с жидким GaIn анодом (энергия характеристической линии излучения – 9.25 кэВ). Юстировка оптической схемы производится с помощью двух моторизованных систем позиционирования оптических элементов, ориентированных на различные экспериментальные методы и расположенных напротив двух каналов вывода излучения рентгеновской трубки. Регистрация данных производится с помощью детекторного блока, включающего в себя энергодисперсионный детектор и три рентгеновские камеры с разной чувствительностью и пространственным разрешением в диапазоне от 1 мкм до 100 мкм.

[1] Barannikov A. et al. Laboratory complex for the tests of the X-ray optics and coherence-related techniques // EUV and X-ray Optics, Sources, and Instrumentation. – SPIE, 2021. – Т. 11776. – С. 50-60.

# КЛАСТЕРНО-СЛОИСТАЯ СТРУКТУРА В ПЛЕНКАХ [Fe/Cr], ВЫЯВЛЕННАЯ МЕТОДОМ GISAXS И СИНХРОТРОННОЙ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

**Р.А. Баулин<sup>1,2</sup>, М.А. Андреева<sup>1</sup>, А.В. Рогачев<sup>2</sup>, Ю.Л. Репченко<sup>2</sup>, С.Н. Якунин<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

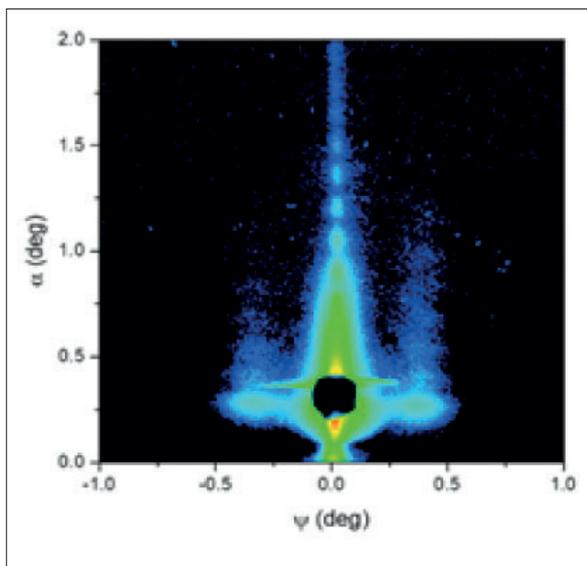


Рис. 1. Карта GISAXS от образца  $[Fe(0.8\text{\AA})/Cr(10.5\text{\AA})]_{30}$

Кластерно-слоистые структуры [Fe/Cr] с ультратонкими слоями железа проявляют множество интересных магнитных свойств, важных для нанотехнологий, таких как антиферромагнитное межслойное упорядочение, гигантское магнитосопротивление, Кондо-подобное поведение электрического сопротивления [1,2]. Эти свойства существенно зависят от формы и размера кластеров железа, их расположения в латеральной плоскости и объема, а также от расстояния между соседними кластерами.

Такую информацию предоставляет метод малоуглового рентгеновского рассеяния в скользящей геометрии (GISAXS).

Мы представляем результаты GISAXS от образцов  $[Fe(0.8\text{\AA})/Cr(10.5\text{\AA})]_{30}$   $[Fe(1.2\text{\AA})/Cr(10.5\text{\AA})]_{30}$ . Измерения проводились на станции «Ленгмюр» Курчатовского специализированного источника СИ. Карты GISAXS была получена при угле скольжения  $\theta = 0.3^\circ$  на длине волны  $\lambda = 0.86 \text{\AA}$ . На карте GISAXS наблюдаются сателлиты при

углах выхода из плоскости отражения  $\psi = \pm 0.35^\circ$ , соответствующие корреляционной длине между кластерами железа в латеральной плоскости образца  $D_{\text{corr}} \sim 154 \text{\AA}$ . Периодичность по глубине образца не была обнаружена (отсутствуют брэгговские максимумы) и наблюдается в системах с более толстыми слоями железа [3]. По данным мёссбауэровской спектроскопии высота кластеров железа не превышает 2–3 монослоя, так как в основной вклад в резонансные спектры от данного образца вносят интерфейсные области [4].

Авторы выражают благодарность В.В. Устинову, Ю.А. Бабанову и Д.А. Пономареву (ИФМ УрО РАН) за предоставление образца.

[1] B. Drovoskov, N.M. Kreines, D.I. Holin, et al., JETP Lett. 88 126–131 (2008).

[2] V.V. Ustinov, L.N. Romashev, M.A. Milayev, et al., JMMM 300, 148 (2006).

[3] V. Ragul'skaya, M.A. Andreeva, A.V. Rogachev, et al. Superlat. and Microstr 125, 16 (2019).

[4] M.A. Andreeva, R.A. Baulin, A.I. Chumakov et al, JMMM 440, 225 (2017).

# БИОГИБРИДНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ КЛЕТОК *E.coli* И БЕЛКА Dps ПО ДАННЫМ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

**Е.А. Беликов<sup>1</sup>, С.С. Антипов<sup>1,2</sup>, Е.В. Парина<sup>1</sup>, А.К. Пелагина<sup>1</sup>,  
О.А. Чувенкова<sup>1</sup>, С.Ю. Требунских<sup>1</sup>, В. Сиваков<sup>4</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>3</sup>,  
А.М. Лебедев<sup>3</sup>, К.А. Фатеев<sup>1</sup>, С.Ю. Турищев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Воронежский государственный университет*

<sup>2</sup>*Институт биофизики клетки РАН*

<sup>3</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>4</sup>*Лейбниц институт фотонных технологий*

Бактериальные клеточные культуры *Escherichia coli* являются источником белка DPS, который представляет собой уникальный, по своим свойствам, наноразмерный объект, включающий в себя органическую оболочку и внутреннюю полость, в которой формируется железосодержащее ядро (~3–6 нм), состоящее из ионов Fe<sup>3+</sup>. Такие нано- биогибридные объекты представляют широкий практический и научный интерес.

В данной работе были исследованы морфологические, структурные свойства, а также атомное и электронное строение, физико-химические свойства бактериальных клеток *E.coli* и молекул Dps. В качестве удобного инструмента исследования морфологических особенностей, а также контрольного метода исследования выступил метод сканирующей электронной микроскопии (Scanning Electron Microscopy – SEM). Для получения информации о структурных особенностях молекулярной культуры, в том числе в исходном состоянии, был применен метод просвечивающей электронной микроскопии (ТЕМ – Transmission Electron Microscopy) и cryo-ТЕМ (Cryo-ТЕМ – Cryo- Transmission Electron Microscopy). Для получения информации о физико-химическом состоянии, атомном и электронном строении были использованы методы рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS – X-ray photoelectron spectroscopy). Также в данной работе был применен метод фотоэмиссионной электронной микроскопии (PhotoEmission Electron Microscopy – PEEM), который сочетает в себе спектроскопический и микроскопический подходы к исследованию образца.

Полученные данные показывают наличие неорганических ядер в молекулах белка Dps, а также присутствие железа в исследуемых клеточных образцах, и достаточно хорошо коррелируют с контрольным методом SEM. Была замечена незначительная деградация клеточной структуры после нахождения образца под рентгеновским пучком.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-72-20180). Методическая проработка синхротронных исследований выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения №075-15-2021-1351.

# ВЛИЯНИЕ МАТЕРИАЛА ПОДЛОЖКИ НА ФОРМИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ УЛЬТРАТОНКИХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ МНОГОСЛОЙНЫХ СИСТЕМ Dy-Co

**А.О. Беляева<sup>1</sup>, И.А. Субботин<sup>1</sup>, М.В. Макарова<sup>2</sup>, Е.А. Кравцов<sup>2</sup>, Э.М. Пашаев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Многослойные периодические системы (МПС) из чередующихся тонких слоев переходного и редкоземельного металлов представляют большой интерес в качестве материалов с управляемыми магнитными свойствами, которые существенно зависят от структурного состояния слоев и интерфейсов между ними. На сегодняшний день гибридные многослойные системы с ультратонкими слоями Dy-Co остаются малоизученными.

Ранее в работах [1, 2] было показано наличие перпендикулярной магнитной анизотропии в многослойных периодических системах Dy/Co на Si подложке при толщине слоев более 1 нм.

Нами были исследованы два образца, состоящие из многослойных периодических систем Dy (2 нм) / Co (3 нм) на кристаллической Si и аморфной SiO<sub>2</sub> подложках. На полевых зависимостях при перпендикулярном направлении поля от образцов присутствует характерная прямоугольная петля гистерезиса. Однако, у образца с SiO<sub>2</sub> подложкой наблюдается двухступенчатое перемагничивание.

Поскольку два исследуемых образца были сформированы в одинаковых условиях, но на разных подложках, изменение их магнитных свойств может быть связано с различием их реальной структуры.

Целью работы являлось определение причины возникновения различных магнитных свойств для идентичных образцов, сформированных на различных материалах подложки. С помощью методов рентгеновской рефлектометрии и рентгеновской дифракции были определены основные структурные параметры исследуемых МПС. Установлено, что сильное взаимное перемешивание слоев Dy и Co приводит к формированию различных интерметаллидов. С помощью качественного рентгенофазового анализа было установлено наличие фазы DyCo<sub>2</sub> и остаточного Co в образце с Si подложкой, и фаз DyCo<sub>2</sub> и DyCo<sub>3</sub> в образце с SiO<sub>2</sub> подложкой. Исследования, проведенные с помощью просвечивающей электронной микроскопии, качественно согласуются с результатами анализа рентгеновских данных и подтверждают формирование указанных выше интерметаллидов.

[1] M.V. Makarova, E.A. Kravtsov, et al., Physics of the Solid State. Vol. 62, №9 (2020).

[2] I.A. Subbotin, E.M. Pashaev, et al., Physica B: Condensed Matter. 573 (2019).

# СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СТРУКТУР ОЛОВО-КРЕМНИЙ

**Н.И. Бойков<sup>1</sup>, О.А. Чувенкова<sup>1</sup>, Е.В. Парина<sup>1</sup>, С.И. Курганский<sup>1</sup>,  
М.Д. Манякин<sup>1</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>2</sup>, А.М. Лебедев<sup>2</sup>, А. Макарова<sup>3</sup>, Д. Смирнов<sup>3</sup>,  
Р. Овсянников<sup>3</sup>, С.Ю. Турищев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Воронежский государственный университет*

<sup>2</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>3</sup>*Helmholtz Zentrum Berlin*

Ограничивающим фактором при создании и производстве электронных устройств на основе кремния можно считать генерацию тепла. Значительное снижение теплопроводности можно добиться за счет формирования периодических многослойных структур Sn/Si. Таким образом, беспорядок в движении фононов более заметен из-за большего отношения масс Sn/Si. В то же время исследования атомного и электронного строения, физико-химического состояния таких структур чрезвычайно важны, играя ключевую роль, выходя за рамки технологии формирования и последующего применения. Целью данной работы было исследование атомного и электронного строения эпитаксиальных наноструктур на основе кремния-олова.

Исследуемые образцы были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке Si(100) с тонким эпитаксиальным буферным слоем Si толщиной 50 нм. На буферный слой Si было нанесено около 5 монослоев олова. Для возможной модификации состава и структуры полученные образцы отжигали *in situ* при температуре 800°C в течение 10 мин. Исследования атомной и электронной структуры проводились синхротронными методами XANES и XPS. Используются расчеты из первых принципов спектров XANES.

Оценены особенности электронного строения и состав эпитаксиальной нанослоистой структуры. Показано, что рост нанослоя олова на поверхности буферного слоя кремния не приводит к заметному межатомному взаимодействию на их границе. В результате не происходит заметных искажений электронно-энергетического спектра. Образующийся нанослой имеет сложный состав различных оксидов олова. Однако высокотемпературный отжиг в сверхвысоком вакууме *in situ* приводит к перестройке фазового состава, сопровождающейся миграцией атомов кислорода от поверхностных атомов олова вглубь структуры к кремнию. Это приводит к полному окислению поверхности буферного слоя монокристаллического кремния, находящегося под 5 монослоями исходного оксида олова, восстановленного до металлического состояния.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 23-22-00465).

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СТАНЦИЯ «ФАЗА» НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**М.М. Борисов<sup>1</sup>, Э.Х. Мухамеджанов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Станция «Фаза», расположенная на канале 2.3 Курчатовского источника синхротронного излучения, представляет собой пилотный проект станций нового поколения. Основные направления исследований на станции включают исследование дефектообразования и эволюции дефектов в современных материалах методом диффузного рассеяния СИ, нанодиагностику неорганических и биоорганических тонкопленочных структур с применением техники стоячих рентгеновских волн, исследование магнитных наноструктур методами резонансной рефлектометрии и стоячих рентгеновских волн, изучение структурных особенностей кристаллов методом резонансной дифракции, определение низких концентраций элементов, методом рентгеновской флуоресценции в условиях полного внешнего отражения СИ и др.

Оптическая схема станции представлена на рисунке 1.

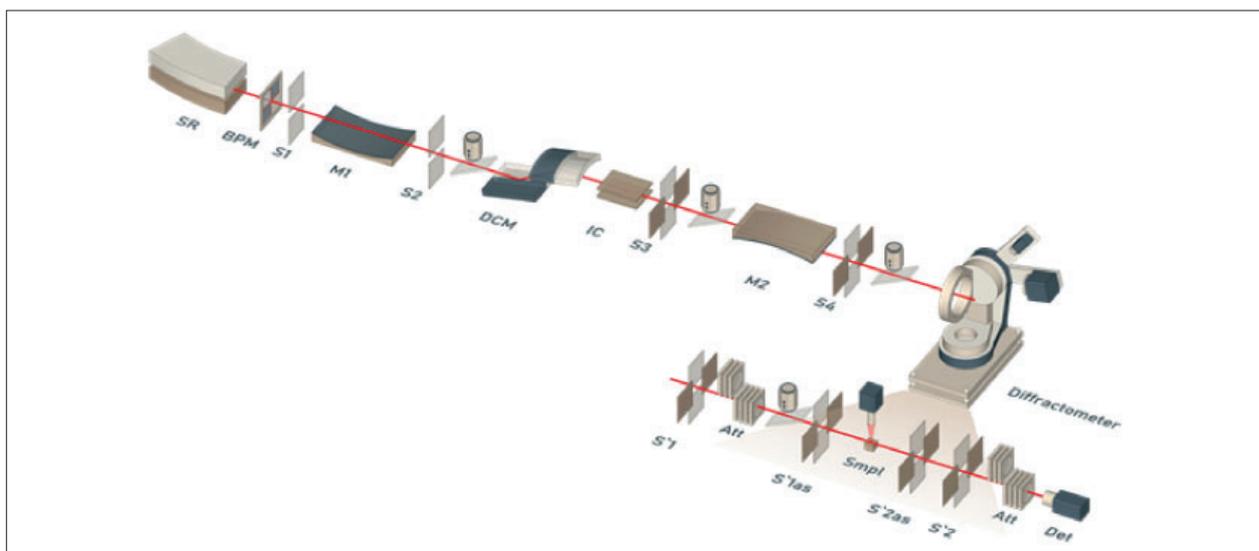


Рис. 1. Оптическая схема станции «Фаза»: SR-источник СИ; BPM-монитор положения пучка; S-щели; M1-коллимирующее зеркало; DCM-двухкристальный монохроматор с сагиттальным изгибом второго кристалла; IC-ионизационная камера; M2-фокусирующее зеркало; S'-щели образца; Att-наборы поглотителей; Smp1-образец; Det-система детектирования

# ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ФУЛЛЕРЕНОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

**П.А. Борисова<sup>1</sup>, М.С. Блантер<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>2</sup>*Российский технологический университет-МИРЭА*

Фуллерены являются метастабильными модификациями углерода и под действием высоких температур и давлений претерпевают ряд фазовых превращений [1]. Эти превращения позволяют получать углеродные наноматериалы с интересными свойствами и представляют значительный интерес.

В настоящей работе представлены результаты исследования [2, 3] двух групп легирующих металлов-карбидообразующих (Fe, Al, V и NiCr) и не карбидообразующих (Ag, Ni) на фазовые превращения фуллеренов C<sub>60</sub> и C<sub>70</sub> при давлениях 2–8 ГПа в температурном интервале 500–1100°C. Образцы с содержанием ~7 ат. % легирующего металла были синтезированы в тороидальной камере высокого давления в ИФВД РАН и исследованы методами дифракции нейтронов (дифрактометр «Диск» на реакторе ИР-8 Курчатовского института), рентгеновской дифракции и Рамановской спектроскопии. Показано, что карбидообразующие металлы существенно повышают стабильность молекул фуллерена и на сотни градусов повышают температуру превращения кристаллического фуллерена в разориентированный (аморфный) графит, тогда как не образующие карбидов металлы практически на исследованные превращения не влияют. Предварительная аморфизация фуллеренов методом механоактивации нивелирует эти эффекты. Также обнаружено, что при одной и той же температуре карбиды образуются при взаимодействии металлов с разориентированным графитом и не образуются при взаимодействии с кристаллическим фуллереном. Таким образом, взаимодействие металлов с модификациями углерода существенно зависит от структуры углеродной фазы. Существенных различий в поведении двух исследованных фуллеренов не выявлено. Объяснение наблюдаемых эффектов взаимодействия металлов с фуллеренами дается на основе известных исследований по первопринципному моделированию молекул фуллерена с инородными атомами [4].

[1] B. Sundqvist, *Physics Reports*, 909, 1 (2021).

[2] M.S. Blanter, P.A. Borisova, V.V. Brazhkin et al. *Mater. Lett.*, 277, Art.no 128307(2020).

[3] M.S. Blanter, P.A. Borisova, V.V. Brazhkin et al. *Mater. Lett.*, 318, Art.no 132199(2022).

[4] M.R. Cerón, V. Maffei, S. Stevenson et al, *Inorg. Chim. Acta* 468 16, (2017).

# НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ СЕГМЕНТИРОВАННЫХ ПОЛИУРЕТАНОВ И МАГНИТНОЙ ПОДРЕШЕТКИ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ

**А.Н. Бугров<sup>1,2</sup>, Б.В. Васильев<sup>1,2</sup>, Р.Ю. Смыслов<sup>1,3</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>4</sup>,  
А.А. Павлова<sup>5</sup>, Г.П. Копица<sup>3</sup>, В.В. Рунов<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Институт высокомолекулярных соединений РАН*

<sup>2</sup>*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»*

<sup>3</sup>*Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова,  
НИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>4</sup>*Объединенный институт ядерных исследований*

<sup>5</sup>*Санкт-Петербургский государственный университет*

Поликонденсацией получены мультиблочные сополиуретанмочевины (ПУМ) и имидазы (ПУИ). Химическая структура гибких и жестких блоков (ГБ и ЖБ) в цепях ПУМ и ПУИ способствует микрофазному разделению. Физически связанные между собой ароматические блоки, образуя жесткофазные домены (ЖФД), дают физические узлы в полимерной матрице, а ГБ придают материалу эластичность. Варьирование длины и химической структуры ЖБ и ГБ в макромолекулах открывает широкие возможности для синтеза полимеров со свойствами термопластов, эластомеров и термоэластопластов.

Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) даёт информацию о надмолекулярной организации сополимеров. Увеличение длины ароматических блоков в цепях ПУМ приводит к укрупнению ЖФД и увеличению расстояния между ними при одной и той же длине ГБ. При переходе от ПУМ с одноядерным диамином к аналогичным структурам с четырехядерным удлинителем цепи размер ЖФД возрастает от 28 до 68 Å. Сравнительный анализ данных МУРН для ПУМ с молекулярной массой ГБ (Mw): 0.5 и 2 кДа при одинаковом химическом строении ЖБ показал, что 4-кратный рост Mw увеличивает расстояние между ЖФД. Исследование надмолекулярной организации ПУМ с помощью МУРН выше и ниже температуры фазового перехода для ГБ позволило оценить, как размер, структура и плотность упаковки ЖФД влияют на сегментальную подвижность и структурные перестройки в ГБ.

При изучении мезоструктуры ПУИ с магнитными наночастицами ферритов (НЧ) наблюдали магнитно-ядерную интерференцию, характеризующую магнитную подсистему неоднородностей в композитах с концентрацией НЧ выше 1 мас.%. Для чистой матрицы ПУИ и при низком содержании НЧ не фиксировали существенных изменений в корреляционных радиусах ЖФД, и в расстояниях между ними из-за ГБ. С увеличением содержания НЧ до 10 мас.% получили укрупнение доменов с 66 до 275 нм в результате формирования агломератов из НЧ и локализации вблизи них ЖБ. Это ограничивает подвижность ГБ и препятствует их переходу из стеклообразного в высокоэластическое состояние при нагреве.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ОТКРУЧИВАНИЯ ДНК ОТ НУКЛЕОСОМ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ И ДЛИНЫ ДНК МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**В.А. Васильев<sup>1</sup>, Н.А. Моторин<sup>1</sup>, Д.А. Афонин<sup>1</sup>, Г.С. Петерс<sup>2</sup>,  
А.В. Моисеенко<sup>1</sup>, Г.А. Армеев, А.К. Шайтан<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Нуклеосомы — это основные единицы компактизации хроматина. Они состоят из 8 гистонов (4 типа гистонов, формирующих гетеродимеры) и ДНК длиной около 145 нуклеотидов. Известно, что на стабильность нуклеосом влияет последовательность ДНК. Существуют такие последовательности, на которых нуклеосомы не только стабильны, но и строго позиционированы. Однако, фундаментальные основы влияния последовательности ДНК на стабильность и позиционирование нуклеосом не ясны. На данный момент известно более 450 структур нуклеосом и их комплексов с другими белками. Однако все они содержат 4 типа последовательностей ДНК с небольшими вариациями. Большая часть известных структур нуклеосом содержит последовательность Widom601. Данная последовательность также часто используется в экспериментах на одиночных нуклеосомах. Однако существуют и другие модельные последовательности, в частности Widom603 часто применяются для исследования прохождения процесса транскрипции через нуклеосомы. Однако, свойства данной последовательности на данный момент изучены плохо. Для исследования влияния последовательности ДНК на структуру нуклеосом были подготовлены образцы одиночных нуклеосом на последовательности Widom601 и Widom603 длиной от 147 до 200 н.п. Произведен эксперимент по рассеянию рентгеновского излучения в растворе нуклеосом (заявка №2404). Показано различие в профилях рассеяния от нуклеосом, собранных на ДНК разной последовательности и длины. Созданы ансамблевые модели, характеризующие степень откручивания ДНК от нуклеосом.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования, грант №075-15-2021-1354.

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ УГЛОВОГО РАЗРЕШЕНИЯ СТАНЦИИ БИОМУР ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НА ИСКУССТВЕННЫХ ОПАЛАХ

**А.А. Велигжанин<sup>1</sup>, Г.С. Петерс<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Угловое разрешение, наряду с минимальным доступным для измерения углом, ограничивает максимальный размер частиц, которые можно исследовать методом малоуглового рассеяния, а также может приводить

к искажениям структурной информации, получаемой этим методом.

Непосредственное измерение углового разрешения в геометрии малоуглового эксперимента затруднено, поскольку, как правило, кривые малоуглового рассеяния не имеют выраженных особенностей, вид которых непосредственно позволил бы выделить влияние углового разрешения. Образцы со сферическими частицами, удобные для подобных измерений, обычно существуют в виде суспензий, которые требуется подготавливать для каждого измерения, поэтому их неудобно использовать в качестве стандартного образца для периодического контроля углового разрешения.

При исследовании порошков искусственных опалов, изготовленных группой Н.И. Юрасова в МГТУ им. Баумана [1], нами была обнаружена ярко выраженная структура в кривых рассеяния, периодическая в зависимости от угла рассеяния, и наблюдаемая в диапазоне  $q = 0.05 - 0.3 \text{ нм}^{-1}$ .

В предположении о низкой полидисперсности шаров оксида кремния, составляющих искусственный опал, и отсутствия дальнего порядка

в расположении шаров, удастся разделить влияние полидисперсности и углового разрешения на кривые малоуглового рассеяния в этом диапазоне и оценить величину углового разрешения. Оценки углового разрешения  $\Delta q \sim 0.006 \text{ нм}^{-1}$  согласуются с независимыми измерениями размера рентгеновского пучка на станции БиоМУР.

[1] И.И. Юрасова, Н.И. Юрасов, Н.К. Галкин, Е.В. Кукуева, А.Н. Захаров // Журнал общей химии, 2022. — Т. 92, №10. — С. 1640–1652.

# ДИНАМИКА УКЛАДКИ ХРОМАТИНА В ЯДРАХ КЛЕТОК ЛИНИИ АДЕНОКАРЦИНОМА ЭРЛИХА С ИНДУЦИРОВАННЫМ РАДИОРЕЗИСТЕНТНЫМ ФЕНОТИПОМ

**В.С. Бурдаков<sup>1</sup>, И.А. Кулаков<sup>1</sup>, Л.А. Иванова<sup>1</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>2</sup>,  
Г.П. Копица<sup>1,3</sup>, Д.В. Лебедев<sup>1</sup>, Ал.А. Богданов<sup>4</sup>, Н.А. Верлов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константина Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Лаборатория нейтронной физики им. Франка Объединенного института ядерных исследований

<sup>3</sup>Институт химии силикатов имени И.В. Гребенщикова РАН

<sup>4</sup>ГБУЗ «Санкт-Петербургский клинический научно-практический центр специализированных видов медицинской помощи (онкологический) имени Н.П. Напалкова»

Одной из проблем, возникающих при лучевой терапии злокачественных новообразований (ЗНО) в клинике, является возникновение субпопуляции клеток, обладающих меньшей радиочувствительностью, чем исходная опухоль. Фракционированное облучение при лучевой терапии приводит к тому, что клетки с радиорезистентным фенотипом могут полностью заместить клетки исходной популяции. Мы предполагаем, что изменения эпигенетического профиля клетки затрагивают, в числе прочего, укладку хроматина в ядре, что, в свою очередь, хорошо объясняет изменения, приводящие формированию радиорезистентного фенотипа. В эксперименте клетки аденокарциномы Эрлиха (АКЭ, перевивная асцитная опухоль мышей) последовательно облучали в установке РХ-30-гамма (источник  $^{60}\text{Co}$ , мощность дозы 0,87 Гр/мин.), после чего перевивались самкам аутбредных мышей ICR (CD-1). Облучение исходной популяции АКЭ показало, что клетки теряли способность к перевивке при дозе облучения 20 Гр и выше. В серии облучений с постепенным увеличением дозы (от 10 до 40 Гр) удалось выделить субпопуляцию клеток, сохранившую способность к перевивке при дозе 40 Гр. Для исходной и радиорезистентной субпопуляции клеток линии АКЭ проведены тесты по оценке чувствительности к действию ионизирующего излучения и получены препараты ядер клеток. Анализ данных рассеяния, полученных на SAXS-дифрактометре показал, что структура ядер АКЭ практически не меняется для образцов, полученных от клеток исходной популяции и переживших облучение дозами 20 Гр и 30 Гр. При этом клетки АКЭ, пережившие облучение дозой 40 Гр, демонстрируют аномально низкую фрактальную размерность в масс-фрактальном режиме (на размерах 40-200 нм). Наблюдения об изменении укладки хроматина хорошо согласуются с данными, полученными при биологической характеристике исследованных образцов, и являются существенными для понимания механизмов возникновения радиорезистентности.

# ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ИОНОВ (НАНОСТРУКТУР) СЕРЕБРА В ЦИНК-ФОСФАТНЫХ МАТРИЦАХ/СТЕКЛАХ

**И.В. Викленко<sup>1</sup>, В.В. Срабионян<sup>1</sup>, В.А. Дурыманов<sup>1</sup>, Я.Н. Гладченко-Джевелекис<sup>1</sup>,  
В.Н. Раздоров<sup>1</sup>, Д.С. Рубаник<sup>1</sup>, Л.А. Авакян<sup>1</sup>, Л.А. Бугаев<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>ЮФУ*

Исследование сред на основе оптически однородных цинк-фосфатных стекол с широким окном прозрачности, содержащих плазмонные наночастицы (НЧ), является перспективной задачей, обусловленной уникальными оптическими свойствами НЧ и особенностью структуры цинк-фосфатных стекол, позволяющей вводить в её состав атомы различных элементов, например, Ag и Au, Nd или Er (вплоть до высоких концентраций) при сохранении оптической однородности стекла.

Оптические свойства таких нанокмозитов зависят от размера НЧ, их архитектуры и степени агломерации. Для тонкой настройки характеристик таких нанокмозитов требуется детальная информация о структурных состояниях выбранных компонентов и их трансформации в ходе синтеза, которая позволит осуществить тщательный подбор исходных компонентов, их концентраций, методов и условий синтеза. Кроме того, в процессе синтеза НЧ многие атомы исходных металлов могут оставаться в состоянии ионов и нанокластеров, не проявляющих заметные плазмонные свойства, но способных оказывать существенное влияние на физические свойства исследуемых материалов. Наличие в образце атомов металлов, находящихся в различных структурных состояниях, могут затруднять их анализ.

Данная работа посвящена разработке методов определения трёхмерной структуры локального атомного окружения центров окраски серебра в цинк-фосфатных стёклах по данным рентгеновской спектроскопии поглощения в околопороговой энергетической области с использованием методов машинного обучения.

Работа выполнена при поддержке РФФ (согл. №23-21-00526). Соавторы В.А. Дурыманов, Д.С. Рубаник и Л.А. Бугаев благодарны гранту РФФ (согл. №23-12-00102) за поддержку выполненных экспериментальных исследований.

# СТАНЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПОГРАФИИ И МИКРОТОМОГРАФИИ РТ-МТ

А.А. Гогин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ Курчатовский институт

В постере представлено описание действующей станции РТ-МТ на канале 1.6. На станции реализованы две экспериментальные схемы – рентгеновская дифракционная топография и рентгеновская микротомография на монохроматическом излучении. Станция позволяет исследовать объекты размерами от единиц миллиметров до двух сантиметров в диаметре с пространственным разрешением 2.5 мкм и 10 мкм на воксель соответственно.

Задача томографии – получение послойного изображения внутренней структуры объекта неразрушающим способом с последующей реконструкцией. Однокристалльная схема монохроматизации пучка позволяет изменять энергию пучка в диапазоне от 10 до 20 кэВ, в зависимости от типа исследуемого объекта.

Большую часть исследуемых образцов составляют биологические материалы – внутренние органы (или их фрагменты) лабораторных животных. Для улучшения контраста все объекты предварительно окрашиваются сильно-поглощающими соединениями на стороне пользователя. Исследование роста раковых опухолей, замещение нейронной ткани в результате нейродегенеративных процессов, работы в области таргетной терапии, поиск механизма прорастания нервной ткани в роговице глаза, исследование биосовместимых имплантов – вот неполный список работ которые были проведены на станции РТ-МТ.

Геологические объекты, материалы, полученные с помощью аддитивных технологий, а также новые композитные материалы зачастую требуют проведения томографического эксперимента для поиска внутренних включений, микроразрывов, каверн или других дефектов, размеры которых не превышают нескольких микрон. Станция РТ-МТ располагает детектирующим устройством с конвертором, позволяющем определить внутреннюю структуру объекта, не разрушая его, и обнаружить включения размером около 4 мкм.

В отличие от лабораторного прибора, томография на синхротронном излучении позволяет проводить эксперименты на порядок быстрее, что является несомненным преимуществом в случае когда пользователь заинтересован в проведении серии однотипных экспериментов.

[1] Готовцев П.М. и др., Изучение распределения клеток дрожжей по грануле биокатализатора для проточного ферментера с использованием метода рентгеновской трехмерной томографии., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 11. С. 23–30. (2017).

[2] Сенин Р.А. и др., Модернизированная станция «Рентгеновская топография и микротомография» на Курчатовском источнике синхротронного излучения., Кристаллография., Т. 58. №3. С. 510–510. (2013).

# СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ ГЕНОМ-АССОЦИИРОВАННЫХ БЕЛКОВ HU И IHF

**А.М. Гордиенко<sup>1</sup>, Л.А. Дадинова<sup>1</sup>, А.А. Можаяв<sup>1,2</sup>, М.В. Петухов<sup>1</sup>, В.А. Манувера<sup>3,4</sup>,  
В.Н. Лазарев<sup>3,4</sup>, Т.В. Ракитина<sup>2,5</sup>, Г.С. Петерс<sup>5</sup>, Э.В. Штыкова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>2</sup>ИБХ РАН

<sup>3</sup>Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины имени Ю.М. Лопухина

<sup>4</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

<sup>5</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Бактериальные нуклеоид-ассоциированные белки (NAP) играют важнейшую роль в организации, репликации, экспрессии и компактизации бактериальных хромосом. В данной работе рассматриваются структурные аспекты двух нуклеоидных белков, которые принимают участие в формировании биокристаллов в живых клетках. К этим белкам относятся HU (гистоноподобный (H) и (U), где U93 – штамм *E. coli*) и IHF (Integration Host Factor).

Нами были определены структурные особенности поведения IHF и HU в растворе. Применялись два взаимодополняющих метода: малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) в качестве основного метода и динамическое рассеяние света (ДРС) в качестве дополнительного. Эти методы позволяют изучать структуру биологических макромолекул в растворе, то есть в условиях, близких к физиологическим.

Впервые были получены трехмерные модели различных олигомерных форм HU и IHF и было показано, что эти белки олигомеризуются в растворе в разной степени. Полученные данные будут полезны в дальнейшем для исследования поведения и взаимодействия нуклеоид-ассоциированных белков в живых бактериальных клетках, что поможет приблизиться к решению проблемы устойчивости бактерий к лекарственным препаратам.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда №18-74-10071 в части исследования белка IHF и при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части исследования белка HU.

[1] L.A. Dadinova, M.V. Petoukhov, A.M. Gordienko et al. // Biochemistry (Mosc). 88, 640 (2023).

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ БЛИЖНЕГО ОКРУЖЕНИЯ ЖЕЛЕЗНОГО ЦЕНТРА МОЛЕКУЛЫ ГЕМОГЛОБИНА ПУТЁМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА XANES СПЕКТРОВ

**А.В. Горячевский<sup>1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>1</sup>, Л.П. Суханов<sup>1</sup>, А.Л. Тригуб<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»*

Выполненные в НИИЦ «Курчатовский институт» экспериментальные исследования плёнок гемоглобина [1, 2] на поверхности жидкости делают актуальной интерпретацию XANES [3] спектров для моделирования процессов самоорганизации, происходящих в ближней сфере Fe-центра гемоглобина. Самоорганизация молекул в окрестности металлоцентра происходит за счет межмолекулярных взаимодействий по донорно-акцепторному механизму. В данном случае он проявляется в виде координационных и водородных связей. Выполненные измерения спектров белковых пленок позволяют пролить свет на особенности самоорганизации вблизи координационного центра и определить состав и структуру ближайшего окружения металлоцентра. Новизной исследования является разработка оригинальной расчётной методики и применение методов квантовой химии для интерпретации XANES спектров молекулы гемоглобина. Квантово-химические методы позволяют рассчитать с контролируемой точностью оптимальные конфигурации кластера металлоцентра, отвечающие минимуму полной энергии кластера.

Прямыми расчетами показано, что структурные изменения в ближней сфере координационного центра проявляются в XANES-спектре вдали от края поглощения, а в непосредственной близости от края поглощения проявляются изменения вдали и вблизи от координационного центра. В спектре [2] пленки гемоглобина на поверхности раствора мочевины выявлен набор состояний ближайшего окружения железного центра, соответствующих форме оксигемоглобина в присутствии молекулы мочевины. При добавлении мочевины к раствору гемоглобина не происходят структурные изменения в первой координационной сфере железного центра молекулы гемоглобина. Изменения касаются лишь внешней сферы вокруг металлоцентра по мягким степеням свободы, то есть по межмолекулярным связям. Все построенные нами кластерные модели свидетельствуют об увеличении интенсивности белой линии в XANES-спектре гемоглобина, обработанного мочевиной.

Методика расчетов перспективна для построения XANES-спектров ближнего окружения железного центра молекулы гемоглобина, обработанного редокс-активными метаболитами.

[1] N.N. Novikova, et al. // J. Phys. Chem. B, 123, 8370 (2019).

[2] N.N. Novikova, et al. // Crystallography Reports, 64, №6, 952 (2019).

[3] Y. Joly // Phys. Rev. B. Cond. Matter Mater. Phys., 63, 125120 (2001).

## СТАТУС СОЗДАНИЯ СТАНЦИИ 1–2 «СТРУКТУРНАЯ ДИАГНОСТИКА» ЦКП «СКИФ»

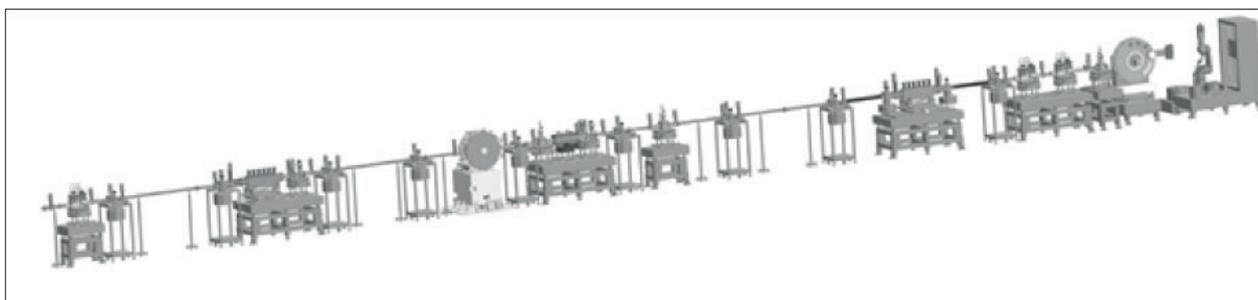
**В.В. Денисов<sup>1</sup>, З.С. Винокуров<sup>2</sup>, Я.В. Зубавичус<sup>2</sup>, А.Н. Шмаков<sup>1,2</sup>, Д.Д. Мищенко<sup>1,2</sup>,  
А.Г. Селютин<sup>2</sup>, С.С. Ковальский<sup>1</sup>, К.В. Бескончин<sup>1</sup>, А.Д. Тересов<sup>1</sup>, М.С. Сыртанов<sup>1</sup>,  
В.Н. Киселев<sup>1</sup>, А.А. Евдокимов<sup>1</sup>, Ю.Н. Панченко<sup>1</sup>, М.В. Андреев<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Институт сильноточной электроники СО РАН*

*<sup>2</sup>Центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа имени Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук» (ЦКП «СКИФ»)*

В докладе представлена информация о текущем состоянии дел по разработке и проектировании станции 1–2 «Структурная диагностика» ЦКП «СКИФ» в целом и по ее отдельным элементам и системам.

Описан состав станции 1–2, особенности спроектированных элементов и систем, а также методы синхротронных исследований, планируемые к реализации на Станции 1–2.



*Рис. 1. Вид модели разрабатываемой станции 1–2 «Структурная диагностика» ЦКП «СКИФ»*

# ТЕКУЩИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СТАНЦИИ «БЕЛОК/РСА» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И ОБЗОР ЯРКИХ РЕЗУЛЬТАТОВ, ПОЛУЧЕННЫЕ В 2022/2023 ГОДАХ

**П.В. Дороватовский<sup>1</sup>, В.А. Лазаренко<sup>1</sup>, Р.Д. Светогоров<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

Исследования в области структурной химии и биологии являются одним из этапов огромного количества научных разработок в современном мире, так как строения вещества помогает подтвердить синтез, а также дает возможность более качественно выполнять расчеты при изучении свойств вещества и их направленному изменению. Несмотря на ежедневное увеличение потребности в решении задач координационной химии и, соответственно, работы с малыми молекулами, количество синхротронных станций использующих метод монокристаллической дифракции на малых молекулах в мире достаточно невелико, что делает каждую из них уникальным научным инструментом.

Для того чтобы предоставить российским пользователям быстрый доступ к установке, способной проводить эксперименты такого типа и получать данные высокого разрешения и широкого спектра образцов, а также дать иностранным пользователям альтернативу, одна из станций источника синхротронного излучения НИЦ «Курчатовского института» была оптимизирована под работу с кристаллическими образцами в потоковом режиме, что позволило ей стать не имеющей аналогов на территории России установкой такого уровня [1–2]. На данный момент «Белок/РСА» позволяет исследовать структуры монокристаллов от простых органических до сложных макромолекулярных комплексов (параметры ячейки 100–200 ангстрем)

Во время доклада будут освещены текущие экспериментальные возможности станции сейчас и после апгрейда магнитной системы курчатовского источника синхротронного излучения, а также показаны яркие результаты, полученные за 2022/2023 года.

[1] V.A. Lazarenko, P.V. Dorovatovskii, Y.V. Zubavichus, A.S. Burlov, Y.V. Koshchienko, V.G. Vlasenko, V.N. Khrustalev, Crystals. 2017. V. 7. P. 325-1-19.

[2] Svetogorov R.D., Dorovatovskii P.V., Lazarenko V.A. Belok/XSA diffraction beamline for studying crystalline samples at Kurchatov Synchrotron Radiation Source // Crystal Research and Technology. – 2020. – Т. 55. – №5. – С. 1900184.

# РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСТРУКТУР ДЛЯ ТЕХНОЛОГИИ БЕЗМАСОЧНОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ НАНОЛИТОГРАФИИ, ПРИМЕНИМОЙ К СОЗДАНИЮ НОВОЙ КОМПОНЕНТНОЙ БАЗЫ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Н.А. Дюжев<sup>1</sup>, М.А. Махиборода<sup>1</sup>, Т.С. Рындина<sup>1</sup>, В.А. Беспалов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский университет «МИЭТ»*

В настоящее время проекционная литография на длине волны 13,5 нм стала ключевой технологией применяемой при изготовлении критических слоев сверхбольших интегральных схем по нанометровым технологическим нормам [1–3]. В частности, установка для экстремальной ультрафиолетовой литографии последнего поколения от компании ASML с проекционным объективом числовой апертуры  $NA = 0,3$  обеспечивает разрешение 13 нм [4]. Для поддержки технологических норм менее 10 нм требуется проекционный объектив с числовой апертурой  $NA > 0,5$ , увеличение которой связано с рядом технологических проблем, в т.ч. с затенениями на маске. Естественным решением этой проблемы является укорочение рабочей длины волны. Также одним из факторов, снижающих производительность литографических установок, является несовпадение максимумов отражения многослойных рентгеновских зеркал. В случае синхротронных источников эти проблемы снимаются, так как длина волны ондулятора позволяет продвинуться в область более коротких волн (от 13,5 нм до уровня 6,6 нм) и может перестраиваться в широких пределах.

Проблема дорогостоящих масок в современных литографах может решаться за счет применения в безмасочной рентгеновской нанолитографии динамической маски с переключаемыми матричными МЭМС (МЭМС – микро-электро-механическая система) элементами, которые могут электростатически регулировать направление синхротронного излучения на пути к рентгенооптической системе после прохождения динамической маски или отражения от ее поверхности и тем самым управлять размером проекции единичного пикселя на пластину, что является привлекательным как для формирования наноструктур с топологическими размерами на уровне 10 нм и ниже, так и для снижения себестоимости их изготовления. В нашей работе разработан единичный МЭМС элемент динамической маски на основе новых материалов и наноструктур, а также исследованы его функциональные характеристики. Кроме того, на его основе разработана матрица МЭМС элементов, которая позволит оптимизировать и усовершенствовать составные части рентгеновского нанолитографа.

[1] S.-S. Kim. et al., Proc. of SPIE. 10143, 1014306 (2017).

[2] <https://www.asml.com/en/products/euv-lithography-systems/twinscan-nxe3400b>.

# МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА МОНОКРИСТАЛЛОВ $(\text{Ni}, \text{Mn}, \text{Cu})_3\text{BO}_5$

**Р.М. Еремина<sup>1</sup>, Е.М. Мошкина<sup>2</sup>, В.А. Шустов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Казанский физико-технический институт имени Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН*

<sup>2</sup>*Институт физики имени Л.В. Киренского ОСП ФИЦ КНЦ СО РАН*

Оксибораты со структурами типа людвигита (структурная формула  $M^2M^3BO_5$ , где  $M$  и  $M$  – ионы металлов с валентностью  $2^+$  и  $3^+$  соответственно) обладают чрезвычайно необычными магнитными свойствами, включая, случайное распределение магнитных ионов, смешанную валентность, сильные электронные корреляции и необычное упорядочение зарядов. Эти свойства обусловлены зигзагообразными стенками в их кристаллической структуре, образованными ионами металлов различной валентности. Другой причиной является наличие четырех неэквивалентных структурных положений, которые могут быть заняты до двенадцати магнитными ионами на элементарную ячейку. Химическая формула и условие электрон-нейтральности людвигита предполагают соотношение между двух- и трехвалентными элементами как 2 к 1, которые могут занимать четыре возможных положения в центре искаженного октаэдра.

Целью работы было определение модели магнитного упорядочения и температурных особенностей структуры людвигитов  $(\text{Ni}, \text{Mn}, \text{Cu})_3\text{BO}_5$ , основываясь на исследовании структурных свойств методами дифракции нейтронов и магнитометрии. Для нейтронографического исследования были выращены раствор-расплавным методом Е. М. Мошкиной образцы, в состав которых входят только изотопы  $^{11}\text{B}$ . Измерения проведены на установке ДИСК ( $\lambda = 1.544 \text{ \AA}$ ) НИЦ «Курчатовский институт». Особенности синтеза представлены в работе [1]. Проведены измерения нейтронных дифракционных спектров керамики  $(\text{Ni}, \text{Mn}, \text{Cu})_3\text{BO}_5$  при температурах 7, 30, 70 и 296К. Параметры элементарной ячейки, позиции атомов и пространственная группа  $P6_{3m}$  установлены с помощью программы Fullprof. Координаты атомов в кристаллической ячейке и параметр заполнения позиций для керамики, параметры элементарной ячейки при нескольких температурах для керамики  $(\text{Ni}, \text{Mn}, \text{Cu})_3\text{BO}_5$  получены.

Данное исследование было поддержано Российским научным фондом (проект №23-72-00047).

[1] E. Moshkina, A. Bovina, et al. CrystEngComm, 23, 5624–5635 (2021)

# СИНТЕЗ И СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А.М. Ермакова<sup>1</sup>, Е.В. Глазунова<sup>1</sup>, Е.Е. Поносова<sup>1</sup>, Э.И. Шеметова<sup>1</sup>,  
Г.Б. Сухарина<sup>1</sup>, Л.А. Авакян<sup>1</sup>, Л.А. Бугаев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Южный федеральный университет

Сегнетоэлектрики со структурой перовскита — это класс материалов, обладающих уникальными электрофизическими свойствами и имеющих широкий спектр применения, например, в различных электронных устройствах. Поскольку методы механоактивации способствуют накоплению структурных дефектов и тем самым приводят к изменению физико-химических свойств сегнетоэлектрических материалов, поэтому целью работы является изучение структуры данных материалов до и после процессов механоактивации [1, 2].

В данной работе изготовление образцов  $\text{PbFe}_{0,5}\text{Ta}_{0,5}\text{O}_3$  (PFT),  $\text{PbSc}_{0,5}\text{Ta}_{0,5}\text{O}_3$  (PMT),  $\text{PbMn}_{0,5}\text{Ta}_{0,5}\text{O}_3$  (PST) осуществлялось с помощью двух методов синтеза — двухстадийного твердофазного и «колумбитного». Механоактивация проводилась в шаровой планетарной мельнице высокоэнергетического помола АГО-2. Помол производился в спиртовой среде в течение 20 минут, частота вращения барабана составляла 1820 об/мин.

Структура полученных образцов исследовалась посредством XAFS спектроскопии в сочетании с компьютерным моделированием с использованием программного комплекса FEFF8. Получена структурная информация о ближнем окружении атомов тантала в исследуемых образцах.

[1] G.B. Sukharina, N.Y. Smolentsev, et al., Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 909, 82 (2018).

[2] K.G. Abdulvakhidov, E.N. Ubushaeva, et al., Ferroelectrics. 494, 1 (2016).

# О ПРЕОБРАЗОВАНИЯХ ГАММА – НЕЙТРОННЫХ ПОТОКОВ В ЭЛЕКТРОСИГНАЛЫ В БИОМОРФНЫХ МИКРОКАНАЛЬНЫХ МАТРИЦАХ

Н.В. Классен<sup>1</sup>, А.Е. Ершов<sup>1</sup>, А.В. Лазарева<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук*

Биоморфные микроканальные матрицы перспективны для радиационной техники по нескольким направлениям. Они формируются пиролизом древесных компонентов растений: нагревом в бескислородной среде сначала испаряются кислород и водород, оставляя углеродный остов из стенок, отделяющих друг от друга цилиндрические микроканалы, параллельные оси ствола. В зависимости от типа дерева диаметр микроканалов может изменяться от нескольких микрон до миллиметров (как у бальсы). Деформированием исходной древесины диаметры микроканалов регулируются от микрометра до десятков микрон. Последующими обработками углеродные стенки могут превращаться в карбиды кремния, титана, железа и др., а капилляры заполняться различными веществами от водных растворов до многих металлов. Большое разнообразие варьирования составов микроканалов и стенок позволяет получать богатый спектр электрических сигналов, снимаемых со стенок и из капилляров. Например, простейший вариант: заполненные водой капилляры и стенки из карбида кремния. Гамма –кванты поглощаются стенками, нейтроны передают энергию протонам воды. Часть электронов, генерированных гамма – квантами, переходит из стенок в воду, часть протонов – в обратном направлении. Стенки заряжаются положительно, раствор – отрицательно. Накапливаемая разность потенциалов может регулироваться изменением электросопротивления между стенкой и раствором (варьированием потенциала двойного слоя на границе). Тем самым можно получить прямой и достаточно эффективный преобразователь радиации в электроэнергию – например, для хранения радиоактивных отходов...

С другой стороны, варьированием химических составов капилляров и стенок легко регулируется соотношение захвата ими тепловых нейтронов, которые неизбежно накапливаются из-за их торможения нейтронами протонами. Соли гадолингия и бора могут вводиться в стенки, и внутрь капилляров, изменяя там зарядовые равновесия. Кроме того, нетрудно вводить и другие материалы с высокими сечениями захвата нейтронов (европий, самарий, кадмий, индий и т.д.) За счет этого пространственное распределение электрических сигналов, снимаемых с разных межкапиллярных стенок, может дать информацию об энергетических распределениях гамма квантов и нейтронов в данном радиационном потоке. В докладе будут представлены примеры энергетической спектроскопии разных вариантов гамма – нейтронных потоков с помощью биоморфных матриц такого рода.

# ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ТЕРАНОСТИКИ НА БАЗЕ ОТЕЧЕСТВЕННОГО КОМПЛЕКСА ПРОТОННОЙ ТЕРАПИИ «ПРОМЕТЕУС»

**И.Н. Завестовская<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН*

Представлены результаты по разработке новых перспективных технологий диагностики и лучевой терапии онкологических заболеваний на основе ядерно-физических технологий с использованием протонных и ионных пучков. Акцент сделан на результатах проекта «Разработка новых технологий диагностики и лучевой терапии социально значимых заболеваний протонными и ионными пучками с использованием бинарных ядерно-физических методов», реализуемого ФИАН при поддержке Минобрнауки в рамках Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы. Результаты в области бинарных технологий сенсibilизации терапии с использованием адресных наночастиц, технологий сочетанного действия ионизирующих излучений различного типа (протоны-нейтроны, протоны-ионы углерода) проходят апробацию на отечественном комплексе протонной терапии «Прометеус». Модернизация этого комплекса с целью развития технологий протонной визуализации и лечения раков различной локализации позволит обеспечить их трансфер в медицинскую практику, что запланировано в организации – соисполнителе проекта – МРНЦ им. А.Ф. Цыба – филиале НМИЦ радиологии МЗ РФ. Анализируются результаты по подготовке кадров, необходимых для развития и внедрения разрабатываемых технологий с акцентом на реализуемые в рамках проекта программы соисполнителя проекта НИЯУ МИФИ.

# МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ НА СТАНЦИИ МОНД РЕАКТОРА ИР-8

**Н.Н. Исакова<sup>1</sup>, А.И. Калюканов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

На реакторе ИР-8 НИЦ «Курчатовский Институт» была введена в строй нейтронографическая станция исследования кристаллической структуры монокристаллов МОНД.

Для реализации методики была спроектирована конфигурация электроники управления, объединяющая работу четырехкружного гониометра, позиционно-чувствительного детектора MAR345 [1] типа *image plate* с чувствительной областью диаметром 345 мм и быстрого шибера монохроматического пучка нейтронов собственной разработки, под управлением программного комплекса mar345 [2].

Выбрана оптимальная стратегия проведения эксперимента, состоящая из четырех  $\omega$ -сканирований в диапазоне  $180^\circ$  с шагом  $1^\circ$  при положении детектора по углу  $2\theta = 30^\circ$  и  $60^\circ$ , которая позволила наиболее эффективно обследовать наибольшую область обратного пространства за разумное время.

Для повышения качества экспериментальных данных предложена и реализована методика вычитания собственного шума детектора из дифракционных картин.

Первичная обработка экспериментальных данных – собственное ПО. Поиск и индентификация рефлексов, определение параметров элементарной ячейки и определение интегральной интенсивности брегговских рефлексов – программа DIRAX [3] и программный комплекс EVAL14 [4]. Уточнение кристаллической структуры может проводиться в любом доступном пакете кристаллографических программ.

Методика протестирована и хорошо подходит для исследования образцов размером  $\sim 1 \text{ мм}^3$  с объемом элементарной ячейки  $\geq 1000 \text{ \AA}^3$ .

Таблица 1. Основные характеристики нейтронной монокристалльной станции МОНД

Монохроматор	Двойной монохроматор PG(002)/PG(002)
Длина волны нейтронов ( $\lambda$ )	Постоянная 1.17 $\text{\AA}$
Плотность потока нейтронов на образце	$\sim 1.0 \cdot 10^5 \text{ н/см}^2/\text{с}$
Размеры поперечного сечения падающего нейтронного пучка на образце	5 × 5 мм, 8 × 8 мм, 10 × 10 мм
Детектор	Позиционно-чувствительный детектор mar345 типа Image Plate
$2\theta \text{ max}$	$110^\circ$

[1] MarResearch, Mar345: Technical Specifications.

[2] Claudio Klein, The mar345 Program Manual Version 2.0 (2000).

[3] A.J.M. Duisenberg, J. Appl. Cryst. 25, 92-96 (1992).

[4] M.M. Antoine Schreurs and all, J. Appl. Cryst. 43, 70–82 (2010).

# МЕТОД ИМПУЛЬСНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ОНДУЛЯТОРОВ

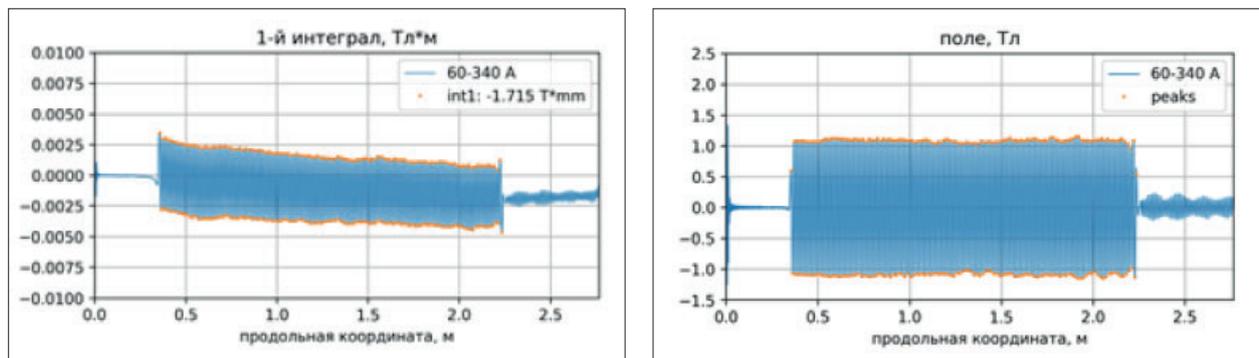
**Ф.П. Казанцев<sup>1</sup>, П.В. Каноник<sup>1</sup>, Н.А. Мезенцев<sup>1</sup>, В.А. Шкаруба<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт ядерной физики имени Г.И. Будкера СО РАН

В статье рассмотрен метод измерения магнитных полей вигглеров и ондуляторов на основе проволоки с импульсным током, в качестве скоростной альтернативы измерениям датчиком Холла. Применены алгоритмы коррекции исходных данных для устранения влияния дисперсии проволоки. Обсуждаются результаты и дальнейшие работы.

В настоящее время ондуляторы широко используются в качестве источников синхротронного излучения. К структуре магнитного поля предъявляются серьезные требования, такие как малая фазовая ошибка и интегралы поля, в связи с этим остро встает вопрос о точных магнитных измерениях.

В импульсном методе через проводник пропускается короткий (~1–100 мкс) прямоугольный импульс тока. Под действием магнитного поля проволока изгибается, а образовавшаяся форма изгиба регистрируется датчиком отклонения проволоки. Данные с датчика напрямую показывают первый или второй интеграл поля, в зависимости от длины импульса [1]. Данный метод является быстрым – однократное измерение занимает около 1 сек., против ~40 мин у прохода датчиком Холла. На основе проволочных измерений можно построить систему быстрой настройки ондулятора.



На рисунках показаны результаты измерений 120-полюсного сверхпроводящего ондулятора с периодом 15.6 мм. Справа – картина магнитного поля, слева – его 1-ый интеграл. Картина интеграла имеет наклон, это связано с наличием постоянной составляющей в магнитном поле. Также видно сильное влияние внешних вибраций.

Импульсный метод имеет потенциал для усовершенствований, однако сейчас он не может применяться как самостоятельный. Дальнейшие работы будут направлены на подавление внешних шумов.

[1] D. Arbelaez, et al. A dispersion and pulse width correction algorithm for the pulsed wire method. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 716 (2013).

# ЛОКАЛИЗАЦИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ МЕДИ В ПОРИСТОЙ МАТРИЦЕ SiO<sub>2</sub> ПО ДАННЫМ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ XANES И ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

**Ю.С. Какулия<sup>1</sup>, Е.В. Паринова<sup>1</sup>, Е.Ю. Канюков<sup>2</sup>, V. Sivakov<sup>3</sup>, С.В. Канныкин<sup>1</sup>,  
Т. Ляйтнер<sup>4</sup>, Р. Овсянников<sup>4</sup>, С.Ю. Турищев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Воронежский государственный университет*

<sup>2</sup>*Московский институт стали и сплавов*

<sup>3</sup>*Лейбниц-институт фотонных технологий*

<sup>4</sup>*Гельмгольц Центр Берлин*

Массивы медных наночастиц являются плазмонными материалами и, таким образом, могут рассматриваться как перспективные структуры, активного элемента в сенсорах, создаваемых на основе эффекта поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния света. При этом ключевым для создания сенсорных устройств на основе таких наноматериалов является понимание физико-химических и структурных свойств. Поэтому необходимо детальное изучение морфологии, состава, структуры, полученных наночастиц меди в матрицах SiO<sub>2</sub> на Si, наряду с атомным и электронным строением материалов.

Для получения пористого слоя SiO<sub>2</sub> на кремнии использовалась технология травления ионно-пролетных треков. Далее в сформированных субмикронных порах происходил рост наночастиц посредством разложения солей меди.

По данным растровой электронной микроскопии были определены морфология и средний размер нанокристаллов в образцах. С помощью рентгеновской дифракции был получен средний размер областей когерентного рассеяния (размеры нанокристаллов). Также проводилась статистическая оценка размеров частиц формирующих структуру в программном пакете ImageJ. Анализ Cu L<sub>3</sub> синхротронных спектров ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES) позволил отметить, что для всех сформированных структур наблюдается изменение степени окисления, вплоть до формирования оксида, близкого к естественному.

В совокупности полученные результаты говорят о том, что используемый подход в формировании структур с наночастицами меди позволяет эффективно получать компактные и размерно-селективные массивы металлических медных наночастиц в контролируемом количестве, заполняющих субмикронные поры диэлектрика на полупроводниковой подложке.

Работа подготовлена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения №075-15-2021-1351.

# ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПОГРАФИИ НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**А.А. Калоян<sup>1</sup>, Е.С. Коваленко<sup>1</sup>, К.М. Подурец<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

Рентгеновская топография является методом исследования реальной структуры высокосоввершенных кристаллов. Применение ярких источников синхротронного излучения дает новые методические возможности и позволяет гибко менять условия эксперимента для исследования различных кристаллов. На Курчатовском источнике синхротронного излучения были реализованы методы топографии качания (с угловой разверткой) и секционной топографии, которые позволяют получать изображение кристалла с содержащимися в нем дефектами, измерять локальные кривые качания и производить картирование амплитуды, ширины и положения этих кривых [1], а также получать объемные картины распределения дефектов. Данные методы были применены для исследования кристаллов ( $\text{ZnGeP}_2$ ,  $\text{LiB}_3\text{O}_5$ ,  $\text{LiNa}_5\text{Mo}_9\text{O}_{30}$ ), которые являются материалом для создания нелинейно-оптических элементов [2], а также кристаллов алмаза и  $\text{FeVO}_3$ , которые применяются в качестве рентгенооптических элементов. Полученные данные имеют прикладное значение, поскольку от локализации дефектов и кристаллического совершенства материала зависит качество конечного оптического элемента.

[1] A. A. Kaloyan, K. M. Podurets, et al., Cryst. Res. Technol., 53, 7 (2018).

[2] V.A. Sukharev, A. P. Sadvovskiy, et al., J. Cryst. Growth., 519, 35–40 (2019).

# НЕЙТРОННЫЙ ДИФРАКТОМЕТР СТРЕСС НА РЕАКТОРЕ ИР-8

**И.Д. Карпов<sup>1</sup>, В.Т. Эм<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Дифракция нейтронов – это высокоэффективный инструмент для неразрушающих исследований внутренних механических напряжений в объёмных поликристаллических объектах. Нейтроны характеризуются высокой проникающей способностью (в основных промышленных сплавах), что даёт возможность проводить прямые измерения деформаций в образцах большой толщины.

Нейтронный дифрактометр СТРЕСС базируется на исследовательском реакторе ИР-8 в НИЦ «Курчатовский институт». Оригинальная конструкция двойного монохроматора из мозаичного пиро-литического графита PG002 и фокусирующего в горизонтальной плоскости совершенного кристалла кремния Si220 обеспечивает высокую плотность потока нейтронов на месте образца ( $\approx 5 \times 10^6$  н/см<sup>2</sup>/с) и хорошее разрешение  $\Delta d/d = 3 \times 10^{-3}$ . На установке реализована схема с фиксированной длиной волны нейтронов ( $\lambda_n = 1.55 \text{ \AA}$ ).

На дифрактометре СТРЕСС доступны измерения в стальных образцах толщиной до 50 мм, в алюминевых – до 150 мм. В то же время, наряду с измерениями на больших глубинах, на дифрактометре СТРЕСС существует возможность проведения исследований с высоким пространственным разрешением вблизи поверхности (на глубинах  $\geq 0,2$  мм) с использованием адаптированного  $\sin^2\psi$  метода.

# ПРОСТАЯ КОМПЬЮТЕРНАЯ ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА МАГНИТНОГО ПОЛЯ ОНДУЛЯТОРА

Н.В. Смоляков<sup>1</sup>, Н.С. Клочков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

Для генерации электромагнитного излучения в накопительных кольцах электронов самое широкое применение нашли ондуляторы на постоянных магнитах. В настоящее время существует большое разнообразие различных конструкций ондуляторов. Существует также ряд компьютерных программ, позволяющих рассчитывать магнитные поля в таких ондуляторах. Однако такие программы, будучи универсальными, достаточно сложны, и требуется некоторая подготовка для работы с ними. С другой стороны, наиболее востребованный случай – расчет плоского ондулятора на постоянных магнитах стандартной конфигурации. Для этого нами была написана простая компьютерная программа для достаточно простой геометрии ондулятора на постоянных магнитах. Она рассчитывает распределения магнитного поля ондулятора заданной геометрии. Эта программа будет очень полезна при конструировании ондуляторов для установки «СИЛА».

Входные параметры для расчета поля задаются посредством текстового файла. На выходе генерируется файл с картой магнитного поля ондулятора.

Пример файла с входными характеристиками:

12.00000 mm – Gap (full) of the undulator  
27.00000 mm – Period length of the undulator  
4.000000 – Number of blocks per 360-deg rotation  
14.00000 – Height of the magnetic blocks  
1.000000 – Block Packing factor,  $0 < BP \leq 1$   
1.200000 T – Block Residual field  
.0000000 mm – Z-coordinate of the field maximum  
-28.00000 mm – Minimum longitudinal (Z) coordinate  
28.00000 mm – Maximum longitudinal (Z) coordinate  
561.0000 – Number of the longitudinal (Z) points  
.000000 mm – Minimum vertical (Y) coordinate  
.000000 mm – Maximum vertical (Y) coordinate  
1.000000 – Number of the vertical (Y) points  
70.00000 – Number of harmonics in the field  $\geq 1$

# СТАНЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ НА КАНАЛЕ 6.3 КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ «КИСИ-КУРЧАТОВ»

**Е.С. Коваленко<sup>1</sup>, А. А. Калоян<sup>1</sup>, К. М. Подурец<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»*

Томография является одним из основных неразрушающих методов изучения трехмерного строения объектов различной природы с помощью рентгеновского излучения. Томографическая станция на Курчатовском источнике синхротронного излучения, расположенная на поворотном магните К 6.3, позволяет проводить исследования внутреннего строения различных объектов со средней плотностью 1–4 г/см<sup>3</sup> и размерами до 90 × 90 × 100 мм с пространственным разрешением около 60 мкм. На станции проведено значительное количество исследований палеонтологических [1–5] и археологических [6–11] объектов.

- [1] A. Pakhnevich, A. Kurkin, et al., *Journal of Imaging*, 4, 8, 103 (2018).
- [2] K.K. Tarasenko, E.S. Kovalenko, et al., *Paleontological Journal*, 52, 12, 106–110 (2018).
- [3] A.V. Pakhnevich, E.S. Kovalenko, et al., *Paleontological Journal*, 53, 7, 715–728 (2019).
- [4] V.V. Bulanov, E.S. Kovalenko, et al., *Historical Biology*, 14 (2022).
- [5] A.O. Ivanov, E.S. Kovalenko, et al., *Paleontological Journal*, 56, 11, 1372–1384 (2022).
- [6] E.S. Kovalenko, K.M. Podurets, et al., *Crystallography Reports*, 64, 5, 841–846 (2019).
- [7] E.S. Kovalenko, M.M. Murashev, et al., *Crystallography Reports*, 65, 6, 1073–1080 (2020).
- [8] V.V. Murasheva, S.Yu. Kainov, et al., *Journal of Archaeological Science: Reports*, 37, 102946 (2021).
- [9] С.Ю. Кайнов, Е.С. Коваленко и др. *Российская археология*, 2, 108–122 (2021).
- [10] E. Kovalenko, M. Murashev, et al. *Journal of Imaging*, 7, 11, 224 (2021).
- [11] Н.А. Макаров, Е.С. Коваленко и др. *Российская археология*, 2, 52–63 (2023).

# КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ $\alpha$ -L-ФУКОЗИДАЗЫ ИЗ МИЦЕЛИАЛЬНОГО ГРИБА *FUSARIUM PROLIFERATUM* LE1 ДЛЯ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

С.А. Корбан<sup>1,2</sup>, А.А. Чеблоков<sup>1</sup>, А.А. Кульминская<sup>1,2</sup>, К.С. Бобров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Петербургский институт ядерной физики  
имени Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Курчатовский геномный центр – ПИЯФ

Фукоиданы – сульфатированные гетерополисахариды, обнаруженные в составе клеточных стенок бурых водорослей и некоторых беспозвоночных. Фукоиданы обладают широким спектром биологических активностей, оказывая противоопухолевое, иммуномодулирующее, антикоагулянтное и противовоспалительное действие [1]. Биологическая активность фукоиданов определяется многими факторами, такими как тип связи между остатками фукозы в полисахаридной цепи, степень разветвления, состав и структура моносахаридов [2, 3]. Наиболее эффективным способом гидролиза, позволяющим получать сульфатированные полисахариды с низкой молекулярной массой, признано использование ферментов.

$\alpha$ -L-фукозидазы – гликозидгидролазы, катализирующие реакции гидролиза фукозидных связей с образованием молекул L-фукозы, широко применяются при исследовании структурных и биологических свойств различных фукозилированных олиго- и полисахаридов.

Ранее нами была создана система экспрессии рекомбинантной  $\alpha$ -L-фукозидазы из мицелиального гриба *Fusarium proliferatum* LE1 [4] на основе дрожжевых клеток *Pichia pastoris* GS115. Разработана схема выделения и очистки  $\alpha$ -L-фукозидазы. Рекомбинантный фермент был выделен и очищен до гомогенного состояния. Была проведена биохимическая характеристика и оценка физико-химических свойств белка.

Для направленного мутагенеза в целях изменения специфичности фермента и его биохимических свойств необходимо знание нативной структуры белка. Для этого нами проведен скрининг условий кристаллизации и получены кристаллы  $\alpha$ -L-фукозидазы игольчатой формы. Ведется работа по оптимизации условий для роста кристаллов, подходящих для рентгеноструктурного анализа.

Работы выполняются при финансовой поддержке «Курчатовского геномного центра – ПИЯФ» программой развития центров генетических исследований мирового уровня, Соглашение №075-15-2019-1663.

[1] Fitton J., et al., Therapies from fucoidan: An update //Marine drugs. 2015. Т. 13. №9. С. 5920–5946.

[2] Andriy Synytsya et al., Carbohydrate Polymers 81 (2010) 41–48.

[3] Bo Li, et al., Fucoidan: Structure and Bioactivity. Molecules (2008), 13, 1671–1695.

[4] Shvetsova S., et al., Journal of Basic Microbiology 55, 471–479 (2015).

# РЕАЛИЗАЦИЯ ВРЕМЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ НА СТАНЦИИ ПРО «КИСИ-КУРЧАТОВ»

**В.А. Коржов<sup>1,2</sup>, А.И. Проценко<sup>1,2</sup>, Я.А. Элиович<sup>2</sup>,  
А.В. Таргонский<sup>1</sup>, А.Е. Благов<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН

Станция предназначена для реализации времяразрешающих методик рентгеновской дифрактометрии и спектроскопии поглощения во временном масштабе  $10^{-1} - 10^2$  с. Ключевым элементом станции является быстрый монохроматор на основе адаптивного элемента рентгеновской оптики (АЭРО). За счет бидоменной структуры кристалл-пьезоактуатор способен перестраивать угловое положение кристалла-монохроматора, тем самым модулируя спектральную характеристику дифрагированного монохроматического пучка. Данный монохроматор позволяет проводить непрерывную запись спектров поглощения. Временная развертка сигнала детектора производится многоканальным анализатором. Для уменьшения воздействий посторонних вибраций на рентгенооптическую схему станция оборудована массивным гранитным основанием.

В настоящее время на станции собрана упрощенная однокристалльная схема для методики рентгеновской спектроскопии поглощения (EXAFS/XANES), с одним АЭРО в роли монохроматора/анализатора.

Методика быстрой регистрации спектров поглощения с помощью АЭРО (QEXAFS) впервые была реализована на станции Ленгмюр [1]. Также показано её практическое применение для исследования автоколебательной химической реакции [2]. Время записи одного спектра составило 1 с.

В продолжении работ по отработке методик спектральной модуляции пучка посредством АЭРО был проведен ряд экспериментов по регистрации К-края спектра поглощения Cu. Адаптивный элемент, бидоменный изгибный актуатор на основе монокристалла  $\text{LiNbO}_3$  с закрепленным дифракционным элементом, кристаллом Si, использовался для непрерывной спектральной модуляции пучка в диапазоне 80 эВ с частотой 78 Гц. Полученные результаты при сравнении с эталонным спектром характеризуются одним и тем же набором особенностей, что говорит о принципиальной возможности использования станции ПРО для проведения времяразрешающих исследований.

В настоящий момент проводится модернизация рентгенооптической схемы станции до двухкристалльного монохроматора на основе 2-х синхронизированных АЭРО.

[1] А.И. Проценко, А.Е. Благов и др., УФН. 191, 1 (2021).

[2] А.И. Проценко, Я.А. Элиович и др., УФН. Принята к публикации.

# МИКРОФОКУСИРОВКА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРЕЛОМЛЯЮЩИМИ ЛИНЗАМИ НА СТАНЦИИ «МИКРОФОКУС»

**А.С. Коротков<sup>1</sup>, А.А. Баранников<sup>1</sup>, Г.В. Пруцков<sup>2</sup>, А.А. Снигирев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Балтийский Федеральный Университет имени И. Канта*

<sup>2</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

Создание рентгеновских пучков микрометрового размера требуется во многих экспериментальных методах для обеспечения высокой локальности исследований. Сюда входит рентгеновская спектроскопия, сканирующие методы визуализации, а также рентгеновская дифракция. Последний метод широко используется при исследовании внутренней структуры вещества под высоким давлением в ячейках с алмазными наковальнями, где необходимо, чтобы падающий пучок взаимодействовал только с образцом, чей размер может достигать нескольких микрон [1].

По принципу работы рентгеновскую оптику можно разделить на отражающую (зеркала), дифракционную (зонные пластины Френеля) и преломляющую (линзы). Зеркала крайне требовательны к качеству отражающей поверхности и угловой настройке. Зонные пластины Френеля наиболее эффективны при энергии излучения не выше 20 кэВ. Преломляющие линзы в свою очередь финансово более доступны, более просты в изготовлении и использовании. Кроме того, они не изменяют траекторию распространения пучка и способны эффективно работать в широком диапазоне энергий от 5 до 200 кэВ [2].

В настоящей работе представлены результаты использования преломляющих рентгеновских линз для фокусировки рентгеновского излучения в фокальное пятно размером 5–10 мкм на станции «МикроФокус», оснащённой поворотным магнитом. В эксперименте использовался набор из 35 алюминиевых и бериллиевых линз, изготовленных в БФУ им. И. Канта, с радиусом кривизны параболического профиля, равным 50 мкм.

Полученные результаты позволяют выполнять на станции исследования вещества в условиях высокого давления методом рентгеновской дифракции. Для повышения падающего на образец пучка оптическую схему можно улучшить путем размещения линз в начале оптической схемы станции, где излучение наиболее интенсивно. Это позволит значительно поднять интенсивность фокусировки и сократить время накопления дифракционных данных.

[1] N. Dubrovinskaia et al. Terapascal static pressure generation with ultrahigh yield strength nanodiamond // Sci. Adv. 2016. V. 2, №7. P. e1600341.

[2] А.А. Снигирев et al. Refractive lenses for high-energy x-ray focusing // High Heat Flux and Synchrotron Radiation Beamlines. 1997. V. 3151. P. 164–170.

# КОМПАКТНЫЙ ТРАНСФОКАТОР ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ИСТОЧНИКОВ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ

**А.С. Коротков<sup>1</sup>, А.С. Нарикович<sup>1</sup>, Д.А. Зверев<sup>1</sup>, И.И. Лятун<sup>1</sup>,  
А.А. Баранников<sup>1</sup>, И.Б. Панормов<sup>1</sup>, А.А. Снигирев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Международный научно-исследовательский центр «Когерентная рентгеновская оптика для установок «Мегасайенс», Балтийский Федеральный Университет имени И. Канта*

С разработкой синхротронных источников нового поколения возникает потребность в развитии существующих рентгеновских методов исследования. Преломляющие рентгеновские линзы [1], ставшие неотъемлемым базовым инструментарием экспериментальных установок благодаря своей простоте в настройке оптической схемы и способности выдерживать высокие тепловые нагрузки [2], являются одним из наиболее ярких примеров усовершенствования технологической базы синхротронных станций.

Широкое распространение преломляющей оптики обусловлено в том числе благодаря созданию трансфокаторов – оптических объективов, способных изменять положение фокуса в зависимости от количества преломляющих линз, выставленных на пути прохождения синхротронного излучения (СИ). С появлением компактного трансфокатора (КТ), отличительной особенностью которого является функция управления оптическими элементами независимо друг от друга [3], появилась возможность использования линз с различными материалами и радиусами в разных компоновках.

Это открывает возможность более тонкой настройки фокусного расстояния, размера пучка, глубины фокуса и значительно расширяет применение КТ в те области, где требуется обеспечивать постоянную настройку энергии и фокусного расстояния. Возможность плавной настройки фокусного расстояния, в частности позволяет использовать КТ в XANES-EXAFS спектроскопии, применяемой для структурного анализа вещества и изучения геометрической структуры материала. В физике высоких давлений, использование компактного трансфокатора позволит исследовать локальные изменения в структуре кристаллической решётки по всему объёму в крупных образцах.

[1] A. Snigirev, I.I. Snigireva, B. Lengeler, V. G. Kohn. Nature. 384, 49 (1996).

[2] A. Snigirev, B. Filseth, et al. High Heat Flux and Synchrotron Radiation Beamlines. 3151, 164–170 (1997).

[3] S. Narikovich, M. Polikarpov, et al. J. Sync. Rad. IUCr. 26, 1208–1212 (2019).

# СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНО-ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ КОМПЛЕКСА [Ni(Salen)] И ЕГО ПОЛИМЕРА В РАЗЛИЧНОМ ЗАРЯДОВОМ СОСТОЯНИИ ПО ДАННЫМ XPS И XAFS

**П.М. Корусенко<sup>1,2</sup>, Е.В. Храмов<sup>3</sup>, О.В. Петрова<sup>1,4</sup>, А.А. Верещагин<sup>1</sup>,  
О.В. Левин<sup>1</sup>, Д.В. Сивков<sup>1,4</sup>, К.А. Бакина<sup>4</sup>, Р.Н. Скандаков<sup>4</sup>,  
В.А. Гаас<sup>1</sup>, А.С. Виноградов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет

<sup>2</sup>Омский государственный технический университет

<sup>3</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>4</sup>ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

В настоящее время в числе систем, перспективных для применения в химических источниках тока (суперконденсаторах и аккумуляторах), рассматриваются электропроводящие полимеры poly-[M(Salen)], которые синтезируются путем электрохимической полимеризации мономерных комплексов атомов переходных металлов (М) с лигандами саленового типа  $[M(O_2N_2C_{16}H_{14})]$  на поверхности электрода [1]. Для разработки эффективных методов синтеза этих полимеров требуется детальная информация об атомно-электронном строении.

В данной работе с использованием методов XPS, NEXAFS и EXAFS проведено сравнительное рентгеноспектральное исследование атомно-электронного строения комплекса [Ni(Salen)] и его полимера poly-[Ni(Salen)] в различном зарядовом состоянии (восстановленном, частично и сильно окисленном). Регистрация XPS спектров (обзорных и основных уровней) была выполнена с применением лабораторного фотоэлектронного спектрометра ESCALAB 250Xi в научном парке СПбГУ. NEXAFS и EXAFS спектры были измерены с высоким энергетическим разрешением, используя оборудование экспериментальных станций «Структурное материаловедение» и НАНОФЭС Курчатовского специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов». В результате проведенного исследования получена детальная информация о химическом (зарядовом) состоянии атома Ni и атомов лиганда (С, N, O), структуре координационного узла  $[NiN_2O_2]$ , межатомных расстояниях (R (Ni-O), R (Ni-N)) в комплексе [Ni(Salen)] и их изменении при переходе от мономера к полимеру poly-[Ni(Salen)].

Исследование выполнено в рамках гранта РФФИ №21-72-10029.

[1] A.C.W. Leung, M.J. MacLachlan, J. Inorg. Organomet. Polym. Mater. 17, (2007), 57–89.

# ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ ИОНОВ ТИТАНА НА КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТИТАНСОДЕРЖАЩИХ ЦЕОЛИТОВ ТИПА MFI

**Г.В. Кравченко<sup>1</sup>, Е.Н. Доморошина<sup>1</sup>, Г.М. Кузьмичева<sup>1</sup>,  
Е.В. Храмов<sup>2</sup>, Л.В. Пирютко<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет»

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Институт катализа имени Г.К. Борескова СО РАН

Для понимания механизма каталитических процессов с участием титаноцеолитов необходимо знание не только структурных характеристик, но и локального окружения ионов Ti, определяемого методом XAS-спектроскопии. Метод XAS применен для изучения цеолитов MFI (пр.гр. Pnma; Z = 8):  $[Ti_x^{4+}Si_{12-x}^{4+}O_{24}] \times wA$  (TS; Si/Ti=47, 53, 60, 73.5 – по данным XRD) и  $[H_x(Al_x^{3+}Ti_y^{4+}Si_{12-x-y}^{4+}O_{24})] \times wA$  (ATS), где A-любые атомные образования, включая воду и остатки темплата. Цель работы – установление связи локального окружения ионов Ti в TS и ATS с их каталитической активностью в реакции эпоксирирования алкенов H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (t = 30°C, τ = 85 мин).

В структурах TS выявлено увеличение КЧ ионов Ti<sup>4+</sup> (с 3.5 до 5) и каталитической активности (селективность по эпихлоргидрину 18.0 – 74.2% и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 26.0 – 90.9%; конверсия H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 7.1 – 67.6%) с уменьшением Si/Ti (73.5 – 47). Максимальное КЧ Ti = 5 (4O+1O<sub>II</sub>/1O<sub>I</sub>) обусловлено взаимодействием Ti<sup>4+</sup> с атомами O каркаса MFI, воды или остатков темплата, а минимальное КЧ = 3.5 – кислородными вакансиями [1].

В ряде ATS найдена примесь анатаза с КЧTi=6 (рентгенография), что подтверждено XANES и расстояниями Ti-O (4O = 1.94Å) по EXAFS, которые показали максимальные значения конверсии аллилхлорида (47.1%), селективности по эпихлоргидрину (61.9%) и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (97.9%). Для ряда ATS с примесью аморфной Al(Ti)-содержащей фазы КЧ Ti = 4 (4O~1.7–1.8Å). Однофазные (по данным XRD) образцы, судя по межатомным расстояниям (Ti-O ~1.9Å), могут иметь в структуре ионы Ti<sup>4+</sup> с КЧ Ti = 5, аналогично TS. Кислородные вакансии в окружении Ti<sup>4+</sup> в структурах ATS не обнаружены.

Работа выполнена при поддержке гранта МНИВО РФ №0706-2020-0026.

[1] G. Kuzmicheva, V. Chernyshev et al., Dalton Trans. 51 (2022).

# СПЕКТРОСКОПИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ФОРМ УРАНА

**А.Д. Крог<sup>1</sup>, А.Л. Тригуб<sup>2</sup>, И.Э. Власова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова*

<sup>2</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

Уран, являясь токсичным и радиоактивным тяжелым металлом, широко вовлечен в атомную энергетику и может представлять серьёзную угрозу для окружающей среды. Мобильность и биодоступность урана в окружающей среде зависит от его физико-химических форм. Многокомпонентность природных систем и низкие концентрации урана в них существенно ограничивают круг методов, доступных для определения его физико-химических форм. С помощью метода спектроскопии рентгеновского поглощения, реализуемого на базе синхротронного излучения, становится возможным исследовать локальную структуру урана в сложных природных объектах с концентрациями порядка ppm. Целью данной работы являлось исследование физико-химических форм урана в ряде модельных объектов и в образце радиоактивно-загрязненного грунта методом спектроскопии рентгеновского поглощения.

Подход к определению физико-химических форм урана в природных радиоактивно-загрязненных образцах на первом этапе включает разработку набора модельных систем, необходимых для установления референсных параметров локального окружения урана в каждой системе. В случае урана в окружающей среде, в качестве модельных системам рассматривались: (1) собственные соединения урана; (2) поверхностные комплексы урана на распространенных в природе минералах; (3) тройные системы как условий конкуренции сорбентов; (4) многокомпонентные системы как полный аналог загрязненных образцов из окружающей среды. В данной работе в качестве собственных соединений были синтезированы и охарактеризованы карбонат уранила, фосфаты уранила разной структуры, оксогидроксид уранила, уранат и диуранат кальция. Двойные системы представляют собой поверхностные комплексы уранила на глинах и органических сорбентах в широком диапазоне условий. В тройных системах анализировалось поведение урана в присутствии оксидов железа (III) и органического вещества. Многокомпонентные системы (почвы) моделировали поведение урана в присутствии глинистых минералов, органического вещества и несиликатного железа в разных соотношениях. Накопленные спектроскопические данные были использованы для определения физико-химических форм урана в образце радиоактивно-загрязненного грунта.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант №19-73-20051.

# ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ PU(VI) И PU(V) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

**А.С. Кузенкова<sup>1</sup>, А.Ю. Романчук<sup>1</sup>, Р.Д. Светогоров<sup>2</sup>,  
А.Л. Тригуб<sup>2</sup>, С.Н. Калмыков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Плутоний – один из самых сложных для изучения элементов, который может присутствовать в растворе одновременно в нескольких степенях окисления, и химическое поведение каждой из них отличается. Ранее в статье Квашниной с соавторами [1] было описано образование наночастиц  $\text{PuO}_2$  из растворов  $\text{Pu(VI)}$  с аммиаком через формирование и последующее растворение фазы  $\text{NH}_4\text{PuO}_2\text{CO}_3$ . В работе Ницше с соавторами [2] наблюдалось формирование фаз состава  $\text{NaPuO}_2\text{CO}_3$  из  $\text{Pu(V)}$  и  $\text{Pu(VI)}$  в растворах, имитирующих природные подземные воды. Несмотря на возможность образования представленных твёрдых фаз  $\text{Pu(V)}$  в естественных условиях, в литературе до сих пор нет подробной информации об этих соединениях.

В данной работе поведение  $\text{Pu(VI)}$  изучалось в водных растворах на воздухе в диапазоне pH от 2 до 12. В течение эксперимента контролировалась степень осаждения плутоний-содержащих фаз, а также значения pH и Eh. Определение степеней окисления Pu в растворе проводилось методом жидкостной экстракции (Д2ЭГФК). Твёрдые фазы характеризовались рентгенофазовым анализом (РФА) и спектроскопией рентгеновского поглощения (XANES, EXAFS) с применением синхротронных источников, а также просвечивающей электронной микроскопией высокого разрешения (ПЭМВР).

В растворах наблюдалось увеличение количества  $\text{Pu(V)}$  со временем. Через 10–20 дней в растворах с  $\text{pH} > 6$  наблюдалось образование твёрдой фазы состава  $\text{KPuO}_2\text{CO}_3$ , что было доказано при помощи РФА и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDX). По данным ПЭМВР обнаружено, что данная твёрдая фаза кристаллизуется в виде крупных гексагональных кристаллов размером  $\sim 1$  мкм. При моделировании спектров EXAFS было обнаружено, что расстояние между плутонием и кислородом в аксиальной плоскости равно  $1,81 \text{ \AA}$ , что значительно отличается от значений  $1,94 \text{ \AA}$ , рассчитанных по порошковой дифракции Эллингером и Захариасеном [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ №23-23-00292

[1] K.O. Kvashnina et al., *Angewandte Chemie*, 2019, 58(49), 17558.

[2] H. Nitsche et al., *Radiochimica Acta*, 1994, 66/67, 3.

[3] F.H. Ellinger and W.H. Zachariasen, *The Journal of Physical Chemistry*, 1954, 58(5), 405.

# **DARIA - КОМПАКТНЫЙ ИСТОЧНИК НЕЙТРОНОВ ДЛЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ**

**Т.В. Кулевой<sup>1,2,3</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» ККТЭФ

<sup>2</sup>НИЯУ «МИФИ»

<sup>3</sup>ТулГУ

Для создания инфраструктуры, обеспечивающей доступность к нейтронным исследованиям сообщества ученых нашей страны от Калининграда до Дальнего Востока, под руководством НИЦ «Курчатовский институт» ведется разработка пилотного образца серийного компактного источника нейтронов DARIA (compact neutron source Dedicated to Academic Research and Industrial Applications). В докладе представлен текущий статус проекта, созданные и создаваемые элементы установки, а также обсуждаются ближайшие шаги по реализации проекта.

# ПОРОШКОВАЯ ДИФРАКЦИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ НА СТАНЦИИ «БЕЛОК/РСА» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Е.С. Куликова<sup>1</sup>, Р.Д. Светогоров<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Современный успех метода порошковой дифракции на источниках синхротронного излучения связан как с типом излучения, так и с современными возможностями детекторных систем. Более высокая яркость и интенсивность, по сравнению с лабораторными источниками, ускоряет набор данных и позволяет исследовать слабо рассеивающие объекты.

В тоже время для получения высокого углового разрешения на рентгенограмме от образца стандартного размера (200–300 мкм) при двумерной регистрации дифракционной картины необходимо использование достаточно большого расстояния образец-детектор. Однако для большинства двумерных детекторов получаемый угловой диапазон оказывается сильно ограничен и недостаточен для получения точной структурной информации об исследуемых объектах. Вследствие этого, на станции «Белок/РСА», установленном на пучке из поворотного магнита, использован принцип сканирующего двумерного детектора. За счет такого подхода становится возможным проводить измерения как в нормальной геометрии (детектор устанавливается перпендикулярно пучку СИ), так и в наклонной, позволяя увеличить угловой диапазон дифракционной картины и повысить точность определения структурных параметров.

Оптическая схема станции «Белок/РСА» включает в себя монохроматор с сагиттальным изгибом второго кристалла для фокусировки пучка в горизонтальной плоскости для получения максимальных значений интенсивности. Гониометр обеспечивает вращение исследуемого образца (помещаемого в специальную криопетлю или тонкостенный капилляр) вокруг горизонтальной оси  $\varphi$ , для обеспечения усреднения дифракционных картин по ориентациям образца. Помимо съемки при комнатной температуре у объектов исследований можно изучать фазовые переходы, как при нагревании, так и при охлаждении.

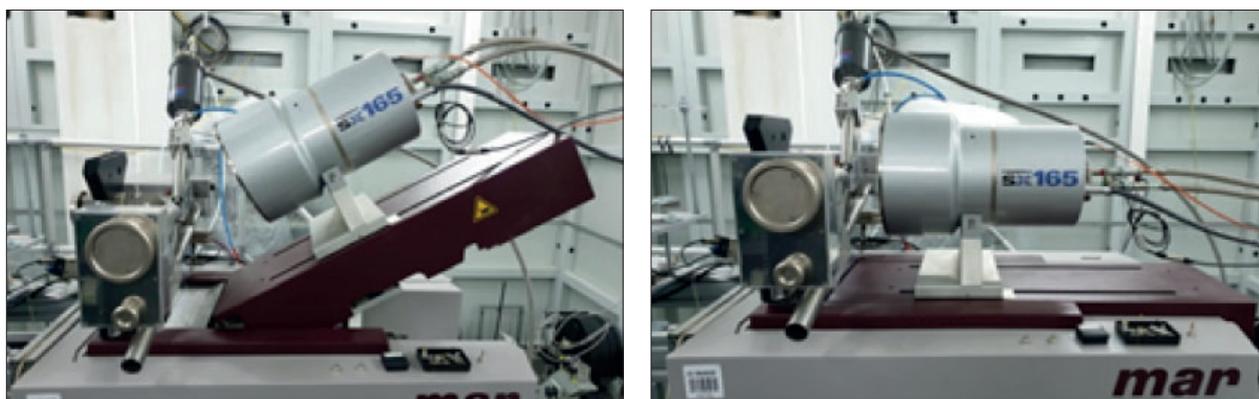


Рис. 1. Дифрактометр станции Белок/РСА

# НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ЯЧЕЙКА

**Г.М. Лаврушин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

Одним из главных факторов, снижающих информативность EXAFS спектров, является тепловое движение атомов. Понижение температуры образцов позволит существенно повысить надежность регистрируемых экспериментальных спектров и точность определяемых структурных параметров. Кроме того, проведение экспериментов с контролируемой температурой позволяет проводить исследования фазовых переходов. Анализ литературных данных показал, что для значительного подавления температурного эффекта достаточно охладить образец до 80–100 К, т. е. охлаждения до температуры жидкого азота достаточно для решения поставленной задачи.

В результате работы выполнен проект низкотемпературной ячейки. Образцы, находящиеся в вакууме, охлаждаются до температуры жидкого азота, который прокачивается через медное холодное тело, которое одновременно служит и держателем образца. Чертежи и расчёт распределения температуры выполнены в программе «SolidWorks 2020». Конструкция ячейки выполнена таким образом, чтобы проводить регистрацию спектров поглощения рентгеновского излучения в режиме «пропускания» и по выходу флуоресцентного излучения. Ячейка образца будет позволять одновременную загрузку до 5 образцов, что позволит существенно сократить время на подготовку к эксперименту.

Изготовление низкотемпературной ячейки образца по предложенному проекту позволит повысить точность рентгеноспектральных методов и будет использоваться на станции СТМ.

# ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ, МАГНИТНУЮ СТРУКТУРУ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ КВАЗИДВУМЕРНЫХ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ

О.Н. Лис<sup>1</sup>, Д.П. Козленко<sup>1</sup>, С.Е. Кичанов<sup>1</sup>, Е.В. Лукин<sup>1</sup>, И.Ю. Зель<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований

Ван-дер-ваальсовы соединения с решёткой типа «пчелиные соты» и слабо взаимодействующими слоями являются одними из интереснейших объектов исследования в области физики конденсированного состояния за счёт недавно открытых магнитных свойств в их двумерных формах. Особенности структуры приводят к значительной чувствительности физических свойств к внешним воздействиям, которые могут вызвать множество необычных явлений, также важные для разработки спинтронных устройств.

Работа посвящена исследованию кристаллической, магнитной структуры и колебательных спектров  $\text{SrBr}_3$  и  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  в широких диапазонах температур и давлений. Проведение исследований при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла с изменениями магнитной структуры, необходимых для понимания природы и механизмов физических явлений, наблюдаемых в исследуемых объектах. Исследования кристаллических и магнитных свойств соединений проводились с помощью нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 реактора ИБР-2 (ЛНФ, ОИЯИ, Дубна, Россия). Нейтронные дифракционные исследования  $\text{SrBr}_3$  позволили обнаружить ниже  $T_c = 37$  К отрицательное тепловое объемное расширение и аномальное поведение межатомных расстояний, углов и рамановских сдвигов, что указывает на проявляющуюся сильную спин-решеточную связь. При повышении давления наблюдается подавление магнитного упорядочения, а полное подавление ФМ-состояния и магнитный переход в АФМ, либо в парамагнитное состояние ожидается при  $P \sim 8,4$  ГПа. Наши результаты также демонстрируют индуцированный давлением изоструктурный фазовый переход в ферромагнетике  $\text{SrBr}_3$ , а также возможный переход в металлическое состояние. Исследования с помощью рентгеновской дифракции  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  также позволили выявить изоструктурный переход при  $P \sim 7$  ГПа. Наблюдаемое аномальное поведение структурных параметров и колебательных мод могут свидетельствовать о конкурирующем характере внутрислоистых (ab) и межслоистых (вдоль c) взаимодействий.

# МОДИФИКАЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ СВЕРХРЕШЁТОК Fe/Gd В РЕЗУЛЬТАТЕ ГИДРИРОВАНИЯ

**И.А. Лихачёв<sup>1</sup>, И.А. Субботин<sup>1</sup>, Ю.М. Чесноков<sup>1</sup>, О.А. Кондратьев<sup>1</sup>,  
А.Л. Васильев<sup>1</sup>, Е.А. Кравцов<sup>2,3</sup>, Э.М. Пашаев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН

<sup>3</sup>Уральский федеральный университет

Многослойные периодические магнитные наноструктуры Fe/Gd, изготовленные методом магнетронного напыления и выдержанные после роста в атмосфере водорода исследовались совместно локальными (электронная микроскопия) и интегральными (рентгеновская дифракция, рентгеновская рефлектометрия) методами структурного анализа. Исследуемые образцы представляли собой многослойные периодические структуры, состоящие из 20 пар чередующихся слоёв гадолиния различной толщины и железа, выращенные на подложке Si (100) с буферным слоем ниобия и покрытые слоем никеля.

Было установлено, что водород проникает в данные образцы на всю глубину и взаимодействует не только с атомами Gd, но и с атомами буферного слоя Nb. При гидрировании происходит увеличение толщины слоёв, содержащих Gd, в результате образования как кристаллических, так и некристаллических фаз гидридов гадолиния.

Показано, что не происходит диффузии атомов Gd в слои Fe. Поликристаллические слои гидридов гадолиния текстурированы – содержат кристаллиты с преимущественной ориентацией в направлении оси [0001] для  $GdH_3$  и осей [111] и [002] для  $GdH_2$ . В слоях, содержащих гадолиний, кристаллиты гидридов гадолиния образуются равномерно внутри слоя в латеральном направлении, и в направлении нормали к поверхности образца. Размеры этих кристаллитов составляют от трети до полной толщины слоя. Толщина слоёв с гадолинием в выращиваемых структурах оказывает важное влияние на формирование фаз гидридов гадолиния внутри них: в слоях с толщинами порядка 10 Å кристаллические фазы не формируются, в слоях с толщинами равным 20 Å и более формируются кристаллические фазы  $GdH_2$ , в более толстых слоях (в нашем случае начиная с 50 Å) формируются ещё и кристаллические фазы  $GdH_3$  [1].

[1] И.А. Лихачёв, И. Субботин, Ю.М. Чесноков и др. Физика металлов и металловедение, принята к публикации.

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДНОГО РАСТВОРА $ZnCl_2$ НИЗКОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ С ЛЕНГМЮРОВСКИМ МОНОСЛОЕМ АРАХИНОВОЙ КИСЛОТЫ КАК МОДЕЛЬ ПРОЦЕССОВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ МЕМБРАНАХ: ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СПЕКТРОВ XANES

**В.Ю. Лысенко<sup>1</sup>, М.А. Кременная<sup>1</sup>, Н.Н. Новикова<sup>2</sup>, А.В. Рогачев<sup>2</sup>,  
С.Н. Якунин<sup>2</sup>, Г.Э. Яловега<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Южный Федеральный Университет

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Одной из важнейших проблем биологии и медицины остается вопрос строения и функционирования биологических мембран. Взаимодействие ионов металлов с биологическими мембранами играет ключевую роль в жизненно важных клеточных процессах, зависящих от контролируемого транспорта ионов через мембрану. Исследование таких явлений становится возможным благодаря уникальным экспериментам «*in situ*» с использованием синхротронного излучения. В работе было рассмотрено влияние концентрации раствора  $ZnCl_2$  водной субфазы на изменение локального окружения ионов Zn при взаимодействии с липидным монослоем арахидиновой кислоты сразу после его формирования на основе данных спектроскопии XANES. Проведена теоретическая интерпретация экспериментальных спектров за К-краем Zn, полученных при регистрации флуоресценции в условиях полного внешнего отражения в режиме реального времени на станции «Ленгмюр». Измерения спектров XANES за К-краем Zn проводились для 3-х концентраций  $ZnCl_2$  в растворе:  $10^{-3}$ ,  $6 \cdot 10^{-4}$ ,  $6 \cdot 10^{-5}$ ,  $3 \cdot 10^{-6}$  моль/л [1].

Анализ спектров XANES свидетельствует о том, что локальное окружение ионов Zn изменяется сразу после формирования ленгмюровского монослоя и зависит даже от незначительных изменений его концентрации. В водном растворе  $ZnCl_2$  критически малой концентрации ( $10^{-3}$  моль/л), доминирующими являются комплексы  $Zn(H_2O)_6$  с ионами  $Zn^{2+}$  октаэдрически окруженными молекулами воды [2]. Взаимодействие молекул арахидиновой кислоты с ионами цинка, сразу после формирования монослоя, предположительно происходит через внутримолекулярное взаимодействие с образованием сподиевых (донорно-акцепторных) связей между катионом цинка и группой OH карбоксильной группы арахидиновой кислоты. При этом симметрия окружения цинка изменяется от октаэдра к искаженному октаэдру с увеличением аксиального расстояния Zn-OH.

Авторы выражают благодарность Гранту Президента МК-2767.2021.1.2 за финансовую поддержку исследования.

[1] В.Ю. Лысенко и др., Конденсированные среды и межфазные границы: 2023; 25(3): 367–372.

[2] В.Ю. Лысенко и др., Кристаллография, 2023, том 68, №2, с. 228–233.

# АЛМАЗНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ МИКРООПТИКА

**И.И. Лягун<sup>1</sup>, С.Н. Шевыргалов<sup>1</sup>, А.С. Коротков<sup>1</sup>,  
В.А. Юнкин<sup>2</sup>, А. А. Снигирев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Балтийский Федеральный Университет имени И. Канта*

<sup>2</sup>*Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН*

Методы когерентного имиджинга могут стать стандартом на российских синхротронных источниках 4-го поколения. Преломляющая оптика удовлетворяет главным требованиям таких методов — сохранению волнового фронта и когерентности источника.

Для получения дифракционно-ограниченного разрешения используется преломляющая микрооптика с малым радиусом кривизны профиля. Существуют следующие разновидности микрооптики: кремниевая 1D оптика, изготовленная по МЭМС технологии [1]; полимерная двумерная оптика, полученная методом 3D-печати [2] и алмазная микрооптика, сформированная методом ионно-лучевой литографии (ИЛЛ) [3]. Кремниевая оптика имеет высокое качество изготовления, но ограничена планарной технологией изготовления и малой эффективной апертурой линзы. Аддитивные технологии уступают в точности фотолитографии, но позволяют изготавливать массивы двумерных микролинз. Однако, структура полимеров деградирует при радиационных нагрузках, приводя к изменению формы линз. Алмазная микрооптика лишена описанных недостатков. Метод ИЛЛ позволяет сформировать двумерный параболический профиль в алмазе с высокой точностью и качеством поверхности. Минимальное поглощение излучения, высокая плотность, термо- и радиационная стойкость выгодно выделяют алмаз на фоне кремния и полимеров.

В данной работе продемонстрированы алмазные микролинзы и микрообъективы с рабочей апертурой 30 мкм и радиусом кривизны параболического профиля 3 мкм. Экспериментально была показана дифракционно-ограниченная фокусировка рентгеновского излучения ( $E = 12$  кэВ) и рассмотрены нюансы использования алмаза, связанные с его внутренней структурой.

[1] V. Aristov, et al. Applied Physics Letters 77.24 (2000): 4058–4060.

[2] A. Petrov, et al. Optics express, 25(13) (2017), 14173–14181.

[3] P. Medvedskaya, et al. Optics Express, 28(4) (2020), 4773–4785.

# ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ-СУПЕРПРОТОНИКОВ

**И.П. Макарова, Н.Н. Исакова, А.И. Калюканов, В.А. Коморников**

*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

*НИЦ «Курчатовский институт»*

Знания о закономерных связях между составом, строением и физическими свойствами кристаллических материалов являются необходимым условием для модификации известных или получения новых соединений с прогнозируемыми характеристиками, для решения фундаментальных проблем физического материаловедения и разработки новых технологий.

Кристаллы-суперпротоны являются представителями семейства  $M_m H_n (AO_4)_{(m+n)/2} \cdot H_2O$  ( $M = K, Rb, Cs, NH_4; AO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4, HAsO_4$ ). Полученные данные позволяют сделать выводы о существовании в этих кристаллах различных механизмов изменений физических свойств. Их основное отличие от большинства водородсодержащих соединений – происходящие в их структуре при внешних воздействиях изменения в системах водородных связей. Это обуславливает особое внимание при их изучении к локализации атомов водорода и водородным связям.

В докладе будут представлены результаты исследования кристаллов сложных сульфат-фосфатов цезия, полученных при изучении водно-солевой системы  $CsHSO_4-CsH_2PO_4-H_2O$ . Применение комплекса взаимодополняющих физических методов, включающего структурный анализ с использованием рентгеновского, синхротронного излучений и нейтронов, способствовало получению экспериментальных данных с высокой точностью и выявлению структурных изменений кристаллических материалов, влияющих на их свойства.

# ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНОЙ РЕОРГАНИЗАЦИИ УЛЬТРАТОНКИХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЛАНТАНОИДОВ

**Н.Н. Новикова<sup>1</sup>, Г.М. Кузьмичева<sup>2</sup>, Ю.Н. Малахова<sup>1,2</sup>, Е.А. Сетяева<sup>2</sup>,  
К.В. Николаев<sup>1,3</sup>, Л.Р. Муфтахова<sup>1,3</sup>, Н.Е. Малышева<sup>1</sup>,  
А.В. Рогачев<sup>1</sup>, С.Н. Якунин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>МИРЭА – Российский технологический университет

<sup>3</sup>Московский физико-технологический институт

Ионы трехвалентных лантаноидов обладают уникальными магнитными и фотофизическими свойствами, что делает их особенно перспективными для создания нано-устройств в молекулярной электронике. Для получения планарных наноструктур на основе лантаноидов весьма эффективным оказался метод Ленгмюра-Блоджетт: формирование монослоев амфифильных молекул (в частности, молекул жирных кислот) на поверхности раствора солей лантаноидов с последующим переносом монослоя на подложку.

Связывание металлов с функциональными группами молекул жирных кислот играет ключевую роль в структурообразовании монослоя. Даже при низких концентрациях адсорбция ионов металлов может вызывать полную реорганизацию монослоя. В связи с этим важной задачей представляется выявление молекулярных механизмов взаимодействия ионов редкоземельных металлов с монослоями жирных кислот.

В представленной работе были проведены исследования нарушения структуры монослоев арахидиновой кислоты (АК), сформированных на растворе солей церия. Рентгеновские измерения выполнены на станции «Ленгмюр» Курчатовского источника СИ, использованы две методики: метод двумерной дифракции в скользящей геометрии и метод стоячих рентгеновских волн. Главным преимуществом таких измерений является возможность проводить *in situ* мониторинг процессов структурообразования в монослое.

Изменения морфологии монослоя АК в процессе поджатия контролировали с помощью метода микроскопии под углом Брюстера. Для оценки термодинамических характеристик монослоев АК были проведены измерения с помощью метода изотерм сжатия и изотерм релаксации.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (проект №0706-2020-0026).

# СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ НА НАНОЧАСТИЦАХ МЕТАЛЛОВ

Ю.А. Саламатов<sup>1</sup>, В.В. Матюхов<sup>1,2</sup>, Е.А. Кравцов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов УрО РАН*

<sup>2</sup>*Уральский Федеральный университет*

В настоящее время особый интерес вызывают наночастицы металлов, покрытые углеродной оболочкой. Таким покрытием может выступать графен, свойства которого также интересны для изучения.

В настоящей работе представлены результаты синтеза нанопорошков Ni@Gr и Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>@Gr методом химического осаждения из газовой фазы. Полученные покрытия исследовались методом рамановской спектроскопии (комбинационное рассеяние света, КРС).

Наночастицы Ni окисляются в атмосферном воздухе, поэтому исходным материалом является нанопорошок Ni-NiO. Синтез проходил при температуре 1035°C при подаче метана с последующим быстрым охлаждением образцов путем открытия обкладок печи реактора.

Оксид никеля полностью восстанавливается с последующим образованием Ni@Gr. По полученным спектрам комбинационного рассеяния света было определено наличие частиц с однослойным и двуслойным графеновым покрытием, а также незначительное количество графита. Отсутствие D-пика на спектрах КРС свидетельствует об отсутствии дефектов в кристаллической структуре графена.

При высокой температуре происходит спекание наночастиц Ni. Чтобы этого избежать, вместо чистого порошка никеля использовалась смесь нанопорошков никеля и сапфира (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). В результате увеличивается количество слоев графена, а также незначительно ухудшается качество кристаллической структуры, о чем свидетельствует возникновение D-пика на рамановских спектрах

Таким образом, в данной работе была показана возможность синтеза наночастиц Ni@Gr и Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>@Gr методом химического осаждения из газовой фазы. В результате мы получаем частицы в оболочке из 1–2 слоев графена, которые представляют интерес для исследования методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Спин», №122021000036-3). Эксперименты выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения №075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения №075-15-2021-1358 от 12 октября 2021 г).

# ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Nb}_{1-x}\text{V}_x\text{Se}_2$ ПО ДАННЫМ XPS И SPEM

**А.И. Меренцов<sup>1</sup>, А.С. Шкварин<sup>1,2</sup>, Е.М. Шерокалова<sup>3</sup>, I. Pis<sup>4</sup>,  
F. Bondino<sup>4</sup>, А.Н. Титов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН*

<sup>2</sup>*Уральский государственный горный университет*

<sup>3</sup>*Уральский федеральный университет*

<sup>4</sup>*Elettra-Sincrotrone Trieste S.C.p.A, S.S. 14 – km 163.5, 34149 Basovizza*

Замещение по подрешётке металла и халькогена в слоистых дихалькогенидах переходных металлов позволяет сохранить слоистую структуру исходной матрицы и улучшить некоторые свойства конечных материалов. Общим свойством монокристаллов подобных твёрдых растворов является гетерогенная морфология: в кристаллах формируются структурные фрагменты, химический состав и взаимное расположение которых зависит от халькогена и металла, формирующего решётку [1–3].

Замещение ниобия ванадием в матрице  $\text{NbSe}_2$  позволяет увеличить степень гидрирования  $\text{Nb}_x\text{Se}_2$  [4]. В настоящей работе методами XPS и SPEM на синхротронных станциях исследована электронная структура монокристаллов  $\text{Nb}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{Se}_2$  и  $\text{Nb}_{0.4}\text{V}_{0.6}\text{Se}_2$  для выявления влияния локального окружения атомов Nb и V атомами Se. Составы были выбраны из тех соображений, что по данным структурных исследований [5] атомы Nb находятся в тригонально-призматическом окружении атомами Se в  $\text{Nb}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{Se}_2$  (4Nb модификация) и в октаэдрическом окружении в  $\text{Nb}_{0.4}\text{V}_{0.6}\text{Se}_2$  (1Т модификация), при этом атомы V не меняют своего октаэдрического окружения.

Электронная структура монокристаллов исследована методами XPS, ResPES и XAS на линии VACN, а также методом SPEM (сканирующая фотоэлектронная микроскопия) на линии ESCA Microscopy синхротрона ELETTRA (Триест, Италия). XPS спектроскопия косвенно (по типичному расщеплению спектра Se 3d) показала наличие структурных фрагментов на основе  $\text{VSe}_2$  и  $\text{NbSe}_2$ , между которыми происходит перенос заряда  $\text{VSe}_2 \rightarrow \text{NbSe}_2$  [6]. Метод SPEM позволил непосредственно увидеть эти фрагменты, определить их химический состав и взаимное расположение.

[1] A.I. Merentsov, Y.M. Yarmoshenko et. al., J. El. Spec. Rel. Phen. 182, 70 (2010).

[2] A.I. Merentsov, A.S. Shkvarin et. al., J. Phys. Chem. Sol. 160, 110309 (2022).

[3] A.N. Titov, A.S. Shkvarin et. al., Chem. Mater. 33, 8915 (2021).

[4] V. Makara, Int. J. Hydrogen Energy. 22, 233 (1997).

[5] M. Bayard, B.F. Mentzen, M.J. Sienko, Inorg. Chem. 15, 1763 (1976).

[6] A.I. Merentsov, A.S. Shkvarin et. al., J. Phys. Chem. Solids 179, 111426 (2023).

# СТАНЦИЯ НЕЙТРОННОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДРАКОН

**М.М. Мурашев<sup>1</sup>, В.П. Глазков, В.Т. Эм<sup>1</sup>, Р.А. Садыков<sup>2</sup>,  
Д.Н. Трунов<sup>2</sup>, С.Н. Аксенов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>2</sup>*Институт ядерных исследований РАН*

С начала XXI в. методы нейтронной визуализации нашли широкое применение во многих областях науки: от материаловедения, геологии, исследования топливных элементов на основе лития и водорода, до палеонтологии, медицины и изучения объектов культурного наследия. Успехи в этих областях в большой степени связаны с развитием вычислительной техники и появлением высокоэффективных детекторных систем, а широта применения метода связана со свойствами нейтронов. Высокая чувствительность тепловых нейтронов к легким атомам, позволяет визуализировать, например, распределение водорода внутри металлических объектов, а монохроматическое нейтронное излучение с длиной волны  $\lambda$  от 2 до 5 Å позволяет визуализировать распределение фаз, внутренние напряжения и текстуру в кристаллических образцах, основываясь на дифракционных эффектах.

В 2016 году на базе исследовательского реактора ИР-8 была введена в эксплуатацию современная специализированная станция нейтронной визуализации ДРАКОН [1], которая является единственным в России и одним из 8 приборов в мире с возможностью использования монохроматического нейтронного излучения с изменяемой длиной волны. На сегодняшний день станция ДРАКОН работает в пользовательском режиме. Основными направлениями исследований, проводимых на станции, является неразрушающий контроль металлических изделий аддитивных производств, исследования палеонтологических и археологических объектов.

[1] В.А. Соменков и др. Установка для комплексной радиационной диагностики «ДРАКОН» // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2019. – №9. – С. 93–99.



# ОСОБЕННОСТИ СОСТАВА, СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ MIL-100(Fe)

**А.Г. Муштаков<sup>1</sup>, Е.Б. Маркова<sup>1</sup>, Г.М. Кузьмичева<sup>2</sup>, И.С. Павлов<sup>3</sup>,  
А.Л. Васильев<sup>3,4,5</sup>, П.В. Конарев<sup>3,4</sup>**

<sup>1</sup>Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «МИРЭА-Российский технологический университет»

<sup>3</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>4</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>5</sup>Московский физико-технический институт

Металл-органические полимеры (металл-органические каркасы-МОФ) – соединения, состоящие из неорганического (ионы или кластеры металлов) и органического (органические молекулы – лиганды или линкеры) компонентов, сочетание которых образует каркасы, транслирующиеся вдоль одного, двух или трех направлений аналогично полимерам. МОФ типа MIL-100(Fe) состава  $[\text{Fe}^{3+}_3\text{O}^{2-}_2\text{X}^-(\text{C}_6\text{H}_3(\text{COO}^-)_2(\text{H}_2\text{O})_2)] \cdot n\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{C}_6\text{H}_3(\text{COO}^-)_2$  – бензол-1,3,5-трикарбоксилат анион) и пр. гр. Fd3m ( $Z = 68$ ) выделяется среди других МОФ большим параметром ячейки, высокой удельной поверхностью и большими размерами пор, биосовместимостью, нетоксичностью (см. напр. [1, 2]), возможностью изменения формального заряда ионов железа. Все эти характеристики зависят от метода (условий) синтеза и оказывают существенное влияние на эксплуатационные свойства (адсорбционные, каталитические и прочие). Цель работы – установление роли условий получения на основные характеристики MIL-100(Fe).

На примере образцов (FeBTC-1, FeBTC-2, FeBTC-3), полученных гидротермальным методом с элементами «зеленой химии» и различающихся pH реакционной среды (~2–3, ~6, ~5), показано отличие их параметров ячейки ( $a = 72.76 \text{ \AA}$ ,  $a = 73.09 \text{ \AA}$ ,  $a = 72.48 \text{ \AA}$ ), средних размеров кристаллитов по Шерреру (33.4 нм, 37.8 нм, **21.3 нм**), диаметров наночастиц по МУРР (9.7 нм – 86.06% и **25.9 нм** – 13.94%, 9.1 нм – 90.28% и 24.0 нм – 9.72%, **9.9 нм** – 96.49% и 25.3 нм – 3.51%) и размеров частиц по СЭМ (FeBTC-1 и FeBTC-3: 300–400 нм и ~**300 нм**,  $\leq 5 \text{ мкм}$  и  $\geq 10 \text{ мкм}$ ). **FeBTC-3** с самыми малыми значениями параметров ячейки и размеров кристаллитов, самыми большими размерами наночастиц и частиц показал беспрецедентно большую удельную поверхность  $S = 6527.1 \text{ м}^2/\text{г}$  (по БЭТ). Активация FeBTC-3 ( $[\text{Fe}^{3+}_3\text{O}^{2-}(\text{OH})^1(\text{BTC})^{3-}_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ) при  $t = 250^\circ\text{C}$ ,  $\tau = 5 \text{ ч}$  привела к изменению состава ( $[\text{Fe}^{3+}_3\text{O}^{2-}(\text{OH})^1(\text{BTC})^{3-}_2]$ ), цвета (от светло-оранжевого до кирпично-оранжевого) и уменьшению параметра ячейки ( $a = 71.97 \text{ \AA}$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов на выполнение проектов Министерства науки и высшего образования РФ №0706-2020-0026.

[1] G. Chen et al., *Molecules*, 24(7), 1211 (2019).

[2] M. Ding et al., *International Journal of Molecular Sciences*. 24(2), 1757 (2023).

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ 4f МАГНИТНОГО СОЕДИНЕНИЯ $\text{EuSi}_2$

**В.Г. Назин<sup>1</sup>, А.М. Лебедев<sup>1</sup>, Л.Л. Лев<sup>2</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>1</sup>, Д.В. Аверьянов<sup>1</sup>,  
И.С. Соколов<sup>1</sup>, О.Е. Парфенов<sup>1</sup>, О.А. Кондратьев<sup>1</sup>,  
А.М. Токмачев<sup>1</sup>, В.Г. Сторчак<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>МФТИ

Создание новых материалов спинтроники диктует поиск соединений с двумерной проводимостью, магнитных металлов с высокой подвижностью, субмонослойных магнитов, надежных спиновых контактов к кремнию [1]. Структурные аналоги графена – силицен и германен – перспективные соединения в этом направлении. Разработанная в НИЦ КИ технология позволяет получать на кремниевой подложке эпитаксиальные тонкие пленки силицена  $\text{EuSi}_2$  с гексагональной структурой  $hp3$ , имеющие высокую подвижность электронов, и в которых имеется сосуществование ферромагнетизма и антиферромагнетизма и магнитный переход при 60 К. Двумерная природа ферромагнетизма проявляется в сильной зависимости температуры Кюри от слабых магнитных полей. Материал проявляет спин-зависимые свойства, такие как колоссальное отрицательное магнитосопротивление, аномальный эффект Холла.

Исследования электронной структуры методами фотоэлектронной (ФЭ) спектроскопии и поглощения пленки  $\text{EuSi}_2$ , покрытой защитным слоем  $\text{SiOx}$  толщиной 2 нм, проведены на станции «Нано-ФЭС» в НИЦ КИ [2]. Определены энергии связи, форма спектров для основных уровней  $\text{Eu}3d$ ,  $\text{Eu}4d$  и  $\text{Si}2p$ . Установлено, что основная часть европия находится в состоянии валентности +2. ФЭ спектры при различных энергиях фотонов от 100 до 1500 эВ (в том числе вблизи резонанса  $\text{Eu}3d$  1135 эВ) показали динамику изменения спектров при изменении глубины выхода фотоэлектронов. Это позволило определить, что на уровне Ферми есть достаточно большая плотность электронных состояний, и основная часть  $\text{Eu}4f$  состояний находится в валентной зоне с энергиями связи 0–3 эВ с максимумом при 1,3 эВ. Это позволяет оценить влияние  $\text{Eu}4f$  уровней на магнитные свойства силицена.

[1] A.M. Tokmachev et al., Nature Communications 9, 1672 (2018).

[2] V.G. Nazin et al., Journal of Alloys and Compounds, 2023, vol. 962, doi:10.1016/j.jallcom.2023.171078

# УЛЬТРАКОМПАКТНЫЙ ТРАНСФОКАТОР НА ОСНОВЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ПРЕЛОМЛЯЮЩИХ ЛИНЗ

**А.С. Нарикович<sup>1</sup>, И.И. Лятун<sup>1</sup>, Д.А. Зверев<sup>1</sup>, И.Б. Панормов<sup>1</sup>, А.А. Лушников<sup>1</sup>,  
А. А. Баранников<sup>1</sup>, А.С. Коротков<sup>1</sup>, А.А. Снигирев<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта*

Последние десятилетия ознаменованы строительством новых, а также модернизацией существующих источников синхротронного излучения (СИ), с предельными характеристиками по размеру источника, яркости излучения и когерентности [1]. Предельные параметры пучков СИ предъявляют новые требования к оптике, задачи которой выходят за рамки обычной фокусировки. Опыт применения рентгеновской преломляющей оптики показывает, что преломляющие линзы [2] и устройства на ее основе стали базовым инструментарием на источниках СИ 3-го поколения.

В работе представлено новое поколение ультракомпактных трансфокаторов на основе преломляющих линз для задач коллимации, транспорта и фокусировки жесткого рентгеновского излучения [3]. Трансфокатор представляет собой оптическое устройство способное изменять положение фокуса в зависимости от количества рентгеновских преломляющих линз, которые выставлены по оптическому пути прохождения рентгеновского излучения. Конструкционные особенности устройства позволяет управлять отдельными оптическими элементами независимо друг от друга, обеспечивая более гибкую настройку фокусного расстояния для широкого круга приложений. Гибкость конструктивных решений для позиционирования рентгеновских линз, малые габаритные размеры и небольшой вес устройств делает ультракомпактные трансфокаторы пригодным для широкого спектра применений, включая неспециализированные станции СИ.

[1] I.A. Ashanin, Yu.A. Bashmakov, et al., // Physics of Atomic Nuclei. Springer, 2018. V. 81, №11. P. 1646–1651.

[2] A. Snigirev, I. Snigireva, B. Lengeler, V. Kohn // Nature. 1996. V. 384, № 6604. P. 49–49.

[3] A. Narikovich, M. Polikarpov, et al. // Journal of Synchrotron Radiation. 2019. V. 26, №4.

# ИЗМЕНЕНИЕ ПРОВОДЯЩЕЙ СТРУКТУРЫ ПОИАНИЛИНА ПРИ ДОПИРОВАНИИ ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

О.В. Недоедкова<sup>1</sup>, В.А.Шматко<sup>1</sup>, В.Ю. Лысенко<sup>1</sup>, Г.Э. Яловега<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Южный федеральный Университет

Композитные системы на основе полианилина ПАНИ являются одними из перспективных и активно синтезируемых в последнее время материалов для суперконденсаторов, так как обладают высокой электронной проводимостью. Свойства полианилина зависят от его состояния окисления. Наибольший интерес представляет полуокисленный полианилин –эмеральдин, в этом случае окислен каждый второй атом азота полимерной цепочки, включающей чередующиеся хиноидные и бензоидные структуры. Изменение проводимости полианилина достигается допированием полианилина протонными кислотами, либо окислителями, например солями переходных металлов [1]. Протонированный полианилин обладает собственной ионной и электронной проводимостью, электрохимической емкостью [2]. Изменение локальной атомной и электронной структуры ПАНИ в результате допирования полианилина солями переходных металлов было исследовано методами спектроскопии рентгеновского поглощения (NEXAFS) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии XPS на станциях «Materials science» синхротронного центра Elettra (Триест, Италия) и структурного материаловедения (СТМ) НИЦ «Курчатовский институт». Теоретический анализ спектров NEXAFS *K*-края углерода эмеральдина, пернигранилина, лейкоэмеральдина был проведен в программе FDMNES. На основе теоретического анализа спектров NEXAFS было установлено, что присутствие металлов вызывает протонирование эмеральдина. Металлы взаимодействуют с полимерной цепью через атомы азота. Это говорит о том, что в композите, полученном бескислотным методом преобладают положительно заряженные иминные группы. В результате образования композита наблюдается трансформация  $\pi$  электронной подсистемы полимера. Исследования химических связей и электронной структуры показали, что для образца, полученного с добавлением оксихлорида циркония, характерно большее содержание протонированных азотогрупп, чем для образца, полученного с добавлением гидрохлорида меди. Модифицирование полианилина солями переходных металлов повышает электропроводность композитов по сравнению с чистым полианилином. Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда №23-22-00459.

[1] V.V. Abalyaeva и др. // Russian Journal of Electrochemistry. 2013. №49, pp. 863–869.

[2] L.G. Bulusheva и др.// Physica Status Solidi B. 2011. Vol. 248. №11, pp. 2484–2487.

# СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ ПИРОХЛОРОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ 3d-МЕТАЛЛОВ

**С.В. Некипелов<sup>1,2</sup>, Н.А. Жук<sup>2</sup>, О.В. Петрова<sup>1</sup>, Д.В. Сивков<sup>1</sup>, К.А. Бакина<sup>1</sup>,  
Р.Н. Скандаков<sup>1</sup>, В.О. Рутковский<sup>1,2</sup>, А.М. Лебедев<sup>3</sup>,  
Р.Г. Чумаков<sup>3</sup>, В.Н. Сивков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

<sup>2</sup>Сыктывкарский государственный университет имени Питирима Сорокина

<sup>3</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Сложные висмутсодержащие пирохлоры вызывают большой интерес в связи с проявлением широкого спектра практически полезных свойств, таких как фотокаталитические, диэлектрические, электрооптические и пьезоэлектрические свойства. Полезным обстоятельством является тот факт, что висмутсодержащим пирохлорам отвечают широкие области гомогенности благодаря структурной гибкости кристаллической решетки пирохлора. Находясь в пределах одного структурного типа и меняя качественный и количественный составы, в том числе допируя структуру малыми содержаниями атомов 3d-металлов, можно существенно варьировать свойства пирохлора, что позволяет изучать влияние химического состава на его физико-химические характеристики.

В представленной работе показаны результаты исследования методами NEXAFS- и XPS-спектроскопии электронного состояния и характера межатомных взаимодействий атомов 3d-металлов в ниобатах, танталатах и антимонатах висмута со структурой пирохлора. Все образцы были исследованы методами рентгеноабсорбционной (NEXAFS) и рентгеноэлектронной (XPS) спектроскопии с использованием синхротронного излучения на станции НаноФЭС Курчатовского центра синхротронного излучения и нанотехнологий [1]. На основании спектральных исследований было показано, что атомы кобальта, никеля, меди и цинка в данных твердых растворах висмутсодержащие пирохлоры присутствуют в основном в степени окисления +2, железа +3, хрома +3/+6, а марганца +2/+3.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения №075-15-2021-1351.

[1] M. Lebedev, K.A. Menshikov, et al., Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 15, 1039 (2021).

# СПЕКТРОСКОПИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ЛАБОРАТОРИИ И НА СИНХРОТРОНЕ: ПРЕИМУЩЕСТВА И НЕДОСТАТКИ

**Д.А. Новичков<sup>1</sup>, А.Л. Тригуб<sup>2</sup>, Е.А. Гербер<sup>1</sup>, Ю.М. Неволин<sup>1</sup>, А.Ю. Романчук<sup>1</sup>,  
П.И. Матвеев<sup>1</sup>, С.Н. Калмыков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Рентгеновская спектроскопия поглощения в настоящее время являются передовым элементом селективным методом определения характеристик для фундаментальных и прикладных исследований в области химии. Одним из преимуществ метода является выявление незначительных изменений структурных и электронных свойств исследуемых материалов, а также является не разрушаемым для образцов методом. Эксперименты обычно проводятся на синхротронах, поскольку дает возможность измерять низкие концентрации и проводить быстрые *in-situ* реакции. Помимо этого, за последнее время рентгеновские спектры можно получить и в лаборатории, поскольку достигнут значительный прогресс в создании лабораторных рентгеновских спектрометров для рентгеновской спектроскопии поглощения [1].

На кафедре Радиохимии МГУ был построен рентгеновский лабораторный спектрометр, основанный на источнике рентгеновского излучения, сферически изогнутом кристалле-монохроматоре типа Иоганна и детекторе рентгеновского излучения. Эти три компонента расположены на круге Роуланда [2]. В работе показаны сравнения экспериментальных данных на актинидах и 3d переходных металлах с синхротроном, *in-situ* измерения [3], а также расчеты электронной структуры.

Лабораторные спектрометры являются надежной, эффективной и доступной альтернативой синхротронам, тестовые измерения показали возможность получения данных с тем же энергетическим разрешением, что и синхротрон, в диапазоне энергий 4–20 кэВ. Таким образом, лабораторные спектрометры могут дополнять синхротроны или использоваться для промежуточных экспериментов для поиска перспективных образцов для синхротронных экспериментов с лучшим разрешением.

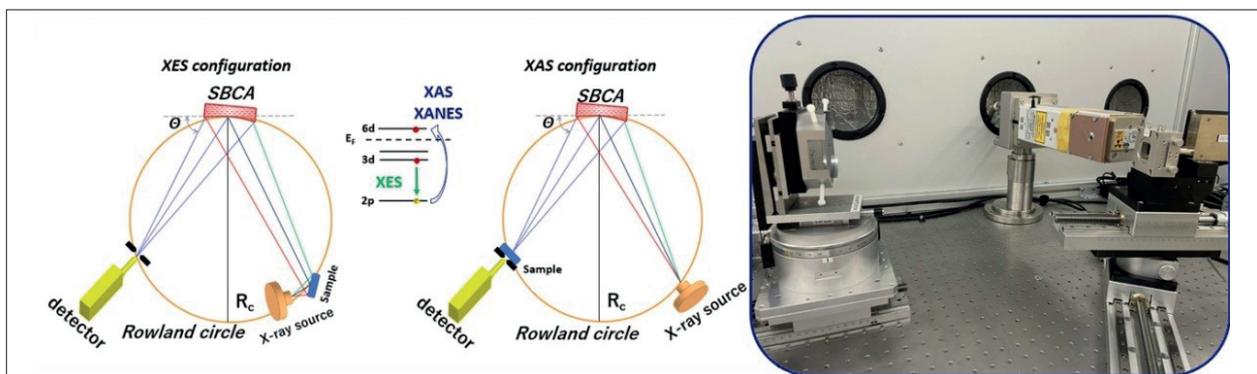


Рис. 1. Схематическое изображение лабораторного рентгеновского спектрометра для режимов XES и XAS, а также фотография спектрометра в конфигурации XAS

[1] P. Zimmermann et al. Modern X-ray spectroscopy: XAS and XES in the laboratory. *Coord. Chem. Rev.* 423, 213466 (2020).

[2] Daniil Novichkov et al. 2023. "Laboratory-Based X-Ray Spectrometer for Actinide Science." *Journal of Synchrotron Radiation* 30(6). <https://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?S1600577523006926>.

[3] Vitalii A. Shevchenko et al. 2023. «Competition between the Ni and Fe Redox in the O<sub>3</sub>-NaNi<sub>1/3</sub>Fe<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/3</sub>O<sub>2</sub> Cathode Material for Na-Ion Batteries». *Chemistry of Materials* 35(10): 4015–25. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.chemmater.3c00338>.

# КИРАЛЬНЫЙ СПИНОВЫЙ БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК В ГЕЛИКОИДАЛЬНЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКАХ С НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНОЙ КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ (НА ПРИМЕРЕ MnSi)

А.А. Повзнер<sup>1</sup>, Т.А. Ноговицына<sup>1</sup>, Э.И. Лопатко<sup>1</sup>, А.Г. Волков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Наблюдаемая при неупругом рассеянии поляризованных нейтронов в киральных ферромагнетиках с нецентросимметричной кубической кристаллической структурой, картина спинового ближнего порядка рассматривается на примере фазовых переходов MnSi с большой кривизной Берри на поверхности Ферми [1]. Показано, что наблюдаемые при неупругом рассеянии поляризованных нейтронов [2] флуктуации спиновых спиралей связаны с киральным ферромагнитным ближним порядком, возникающим вследствие кривизны Берри. Это состояние, возникающее вследствие смены знака параметра межмодового взаимодействия, характеризуется лево киральными вихревыми микроструктурами и сопровождается скачком объемного коэффициента теплового расширения (ОКТР) [3]. В парамагнитной области возникает наблюдаемый на нейтронном эксперименте [4] спиновый ближний порядок с вихревыми микроструктурами обоих знаков спиновой киральности. При этом мы показываем, что в области парамагнитной смешанной киральности возникает экспериментально наблюдаемое (и все еще не объяснённое теоретически) «плечо» на тепловом расширении. При повышении температуры киральное парамагнитное состояние исчезает, вследствие энергетического сдвига химического потенциала из области кривизны Берри. При этом локальная намагниченность, киральное взаимодействие Дзялошинского-Мория и аномальное «плечо» на температурной зависимости ОКТР – исчезают. Полученные теоретические результаты согласуются с экспериментальными данными.

[1] M.A. Wilde, M. Doderhöft et al., Nature 594, 374 (2021).

[2] M. Janoschek, M. Garst et al., Phys. Rev. B 87, 134407 (2013).

[3] С.М. Стишов, А.Е. Перова. УФН 181, 1157 (2011).

[4] C. Pappas, E. Lelièvre-Berna et al., Phys. Rev. Lett. 102, 197202 (2009).

# ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КИРАЛЬНЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКАХ $\text{FeMnSi}$ С КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ БЕЗ ЦЕНТРА ИНВЕРСИИ

Т.М. Нуретдинов<sup>1</sup>, А.А. Повзнер<sup>1</sup>, Э.И. Лопатко<sup>1</sup>, Т.А. Ноговицына<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Уральский федеральный университет имени Б.Н. Ельцина*

Рассматриваются причины возникновения, наблюдаемой на нейтронном эксперименте, сложной картины киральных спиновых вихревых наноструктур, возникающих в геликоидальных ферромагнетиках семейства  $\text{B20}$  [1] (прототипы спинтронных материалов). На примере геликоидального ферромагнетика  $\text{FeMnSi}$  ( $0,16 > x > 0,04$ ) показано, что киральный ближний порядок возникает при топологических электронных фазовых переходах (ТЭП). При этом получено, что ТЭП индуцируются межмодовыми взаимодействиями, связанными с термодинамическими и концентрационными флуктуациями. Вследствие ТЭП вместо парамагнитного состояния (как это имеет место при термодинамических фазовых переходах первого рода) возникает спиновый ближний порядок с фазами Берри, который характеризуется киральными топологическими зарядами.

Вырождение Берри также приводит к возникновению пространственных флуктуаций волн спиновой плотности (ВСП), вследствие чего локальная намагниченность реализуется за пределами фазы дальнего порядка. В рамках модели сильно коррелированной электронной структуры Хаббарда-Канамори, и с учетом результатов  $\text{GGA}+\text{U}$  расчета DOS в коде Elk, построены  $h$ - $T$  диаграммы возникающих спиновых фаз, в которых ожидаются аномально большие параметры, связанные с топологическим эффектом Холла [2]. Обсуждаются перспективы разработки новых спинтронных наноматериалов на основе  $\text{FeMnSi}$  и представляющие в этой связи интерес эксперименты по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов.

[1] C. Pappas, E. Lelièvre-Berna, P. Falus, P. M. Bentley, E. Moskvin, S. Grigoriev, P. Fouquet, B. Farago, Phys. Rev. Lett. 102, 197202 (2009).

[2] Neubauer, C. Pfeleiderer, B. Binz, A. Rosch, R. Ritz, P. G. Niklowitz, and P. Böni. Phys. Rev. Lett. 102, 186602 Erratum Phys. Rev. Lett. 110, 209902 (2013).

# СИНТЕЗ БИМЕТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА $[\text{PtPy}_2(\text{FcCOO})_2]$ И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ EXAFS ПРОДУКТОВ ЕГО ТЕРМОРАСПАДА – ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ КАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

**Н.К. Огаркова<sup>1,2</sup>, А.С. Попова<sup>2</sup>, Н.С. Смирнова<sup>2</sup>, Е.В. Храмов<sup>2</sup>, И.А. Якушев<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Российский университет дружбы народов

<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН

Изучение гетерометаллических координационных соединений платиновых металлов, их структурных особенностей и взаимосвязи структура свойства представляет интерес в связи с возможностью использования этих соединений в качестве гомогенных катализаторов и предшественников нанесенных катализаторов [1]. В настоящей работе предложен новый метод синтеза гетерометаллических комплексов  $[\text{Pt}(\text{Py})_4(\text{FcCOO})_2]$  (Рис. 1), основанный на введении атома дополнительного металла к атому платины, добавлением металлосодержащей кислоты.

Изучены закономерности изменения типа координации ферроценкарбоксилат-анионов и синтезированы гетерометаллические комплексы на основе Pt(II) и анионов ферроценкарбоновой кислоты:  $[\text{PtPy}_4](\text{FcCOO})_2 \cdot 2\text{MeCOOH}$  (I) и *trans*  $[\text{PtPy}_2(\text{FcCOO})_2]$  (II) [2]. Методом XAFS спектроскопии в режиме *in situ* установлено, что термораспад комплекса II в восстановительной среде до 400°C приводит к образованию биметаллических PtFe частиц (Рис. 2).

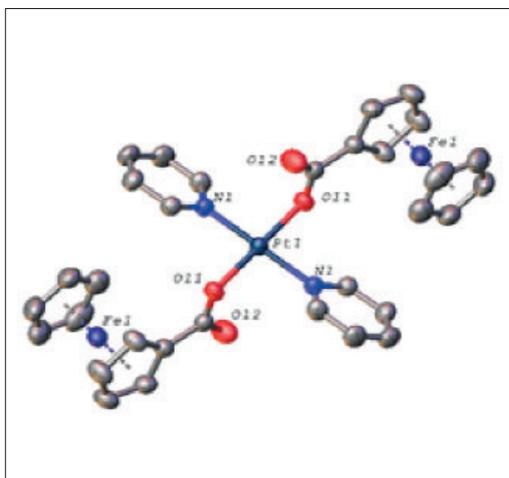


Рис. 1. Структура *trans*  $[\text{PtPy}_2(\text{FcCOO})_2]$

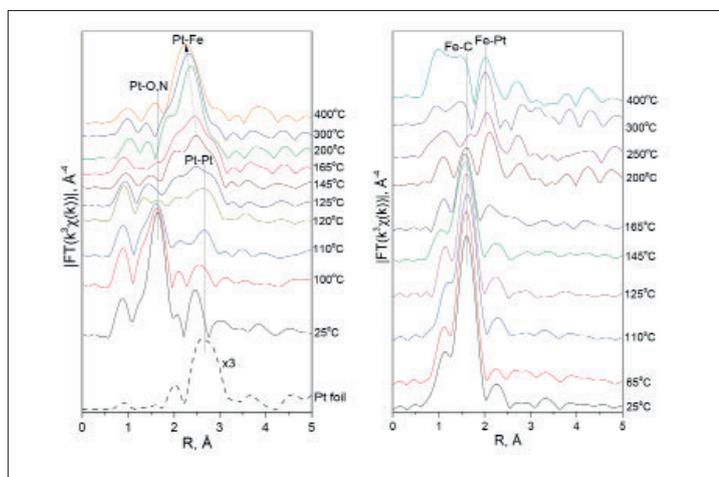


Рис. 2. Данные XAS *in situ* PtL<sub>3</sub>-края и Fe-края *trans*- $[\text{PtPy}_2(\text{FcCOO})_2]$  комплекса при восстановлении от 25 до 400°C в потоке H<sub>2</sub>/He

[1] S. Wang, D. Zhang, et al., ACS Appl. Mater. Interfaces, 6, 12429 (2014).

[2] I.A. Yakushev, N.K. Ogarkova, et al., Mendeleev Commun., 33, 487–490 (2023).

# НОВЫЕ ПОДХОДЫ В СИ-ТОМОГРАФИИ СУСТАВОВ С ПОМОЩЬЮ РЕНТГЕНО-КОНТРАСТНЫХ НАНОЧАСТИЦ И ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.И. Омельченко<sup>1</sup>, К.М. Подурец<sup>2</sup>, И.Г. Дьячкова<sup>1,3</sup>, Д.В. Золотов<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН,  
Институт Фотонных технологий

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН,  
Институт Кристаллографии

Разработаны новые подходы в рентгено-томографии суставов с контрастирующими наночастицами оксидов металлов и оксидных бронз. В качестве рентгеновских источников использовались синхротронное излучение (станция Медиа́на КЦСНИ) и рентгеновский томограф ИК РАН. Проведена проверка пропускания излучения хрящевой пластины и модельных образцов на основе акриловых гидрогелей, пропитанных наночастицами оксидов железа и щелочных оксидных бронз титана и молибдена.

С помощью рентгеновского томографа ИК РАН на пучке с  $E = 8$  кэВ получены изображения сагиттальных разрезов образцов берцовой кости с хрящевой пластинкой, пропитанной наночастицами молибденовой бронзы.

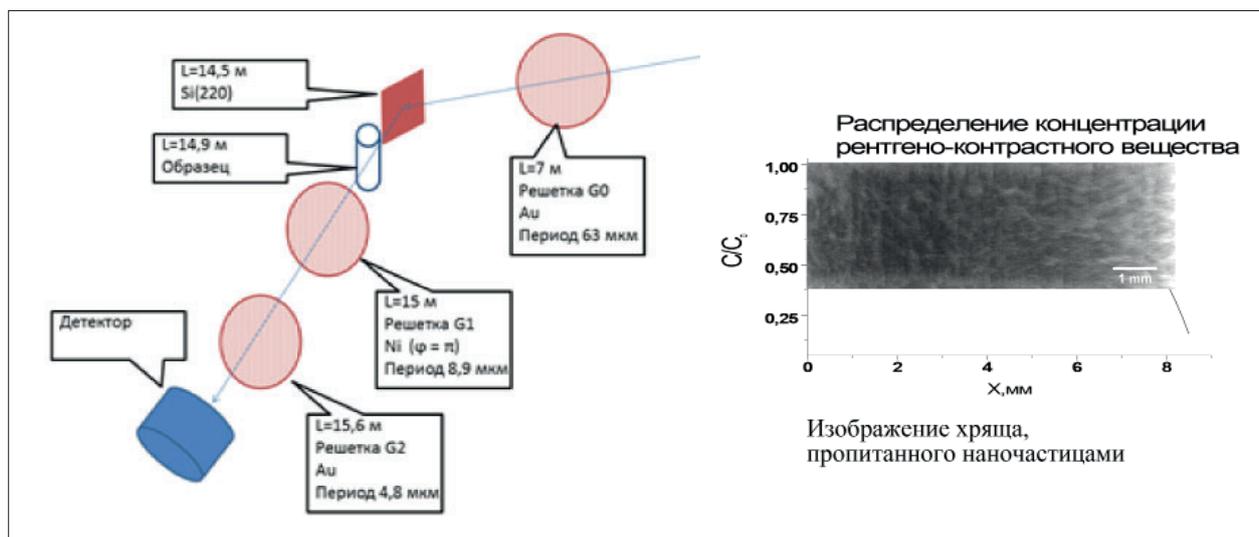


Рис. 1. Схема измерения пропускания образцов на канале СИ «Медиа́на»  
 $E = 25$  кэВ

# ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОЙ АРХИТЕКТУРЫ КОСТНОЙ ТКАНИ. ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ НОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

**А.А. Павлычев<sup>1</sup>, К.О. Брыкалова<sup>1</sup>, А.В. Корнеев<sup>1</sup>,  
Н.Н. Корнилов<sup>2</sup>, А.А. Черный<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>СПбГУ

<sup>2</sup>НМИЦ Травматологии и Ортопедии

Представлены результаты систематического исследования атомно-молекулярной архитектуры (АМА) иерархически организованной материи и механизмов, отвечающих за ее пространственно-временную трансформацию в физиологических и патогенных условиях. Данные результаты создают фундамент развития новых бионанотехнологий для медицины и конструирования новых материалов.

Акцент поставлен на костную ткань как наиболее сложную материю в природе, состоящую из двух тесно взаимодействующих иерархически организованных (белковой и минеральной) подсистем. Показано, что минерализованная кость является, своего рода, электрической батареей [1], составленной из наночастиц отрицательно заряженных нанокристаллов гидроксилатапата, окруженных положительно заряженными гидратными нанослоями. Заряды нанокристаллов и электростатическая энергия минерального матрикса максимальны в молодой кости и уменьшаются с возрастом. Органическая подсистема активно участвует в преобразовании энергии и в процессе биоминерализации. Изучены механизмы возрастных изменений и механизмы влияния механических нагрузок на АМА костной ткани и на развитие остеоартритных изменений [2].

Дальнейшие исследования требуют использования источников синхротронного излучения, нейтронов и антипротонов. Их применение будет способствовать решению важнейших задач повышения качества жизни (противодействию возрастным изменениям, последствиям COVID 19, и ранней диагностики заболеваний), а также созданию новых экологически чистых материалов для аккумуляции и преобразования электрической энергии.

Исследование поддерживается РФФ, грант 23-29-00172.

[1] X.O. Brykalova, et al., J. Mater. Chem. A, 10, 22686 (2022).

[2] A. Pavlychev, et al., Crystals, 13, 381 (2023).

# СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУР НИТЕВИДНОГО КРЕМНИЯ

**А.К. Пелагина<sup>1</sup>, Е.В. Парина<sup>1</sup>, О.А. Чувенкова<sup>1</sup>, Д.А. Коюда<sup>1</sup>,  
Д. Смирнов<sup>2</sup>, А. Макарова<sup>2</sup>, Р. Овсянников<sup>2</sup>, Д. Ермухамед<sup>3</sup>, Т. Минг<sup>4</sup>,  
В. Сиваков<sup>4</sup>, С.Ю. Турищев<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Воронежский государственный университет*

*<sup>2</sup>Гельмгольц Центр Берлин*

*<sup>3</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби*

*<sup>4</sup>Лейбниц Институт Фотонных Технологий*

Массивы нанонитевидного кремния (НК), сформированные методом металл-ассистированного жидкофазного химического травления, являются перспективным наноструктурированным объектом.

Актуальными вопросами являются исследования атомного и электронного строения экспериментальными рентгеноспектральными методами, дающими прямую информацию о специфике локального атомного окружения и физико-химическом состоянии. Использование высокоинтенсивного синхротронного излучения установок класса «мегасайенс» является необходимым условием регистрации спектров высокого разрешения, особенно, когда речь идет о наноматериалах.

В работе нами предложен метод, позволяющий получить информацию о физико-химическом состоянии, атомном и электронном строении поверхностей глубоких слоев массива нитевидного кремния; половина площади поверхности каждого образца механически удалялась путем однократного проведения специально подготовленным лезвием в перчаточном шкафу (glove-box) в инертной атмосфере аргона. Локальная атомная структура меняется незначительно, а согласно последующим исследованиям методом сканирующей электронной микроскопии, большая часть нитей скалывается, и небольшое количество фиксируется на поверхности под углом, вскрывая «боковые» части. Таким образом, предложенная механическая модификация позволила получить XANES и XPS сигнал от объемной части массива НК, включая границу с подложкой.

Работа подготовлена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения №075-15-2021-1351.

# РАЗВИТИЕ МЕТОДА МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА СТРУКТУРЫ СЛАБОУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ НА СИНХРОТРОННОЙ СТАНЦИИ «БИОМУР»

**Г.С. Петерс<sup>1</sup>, П.В. Конарев<sup>1,2</sup>, В.В. Волков<sup>1,2</sup>, А.А. Велигжанин<sup>1</sup>,  
М.А. Марченкова<sup>1,2</sup>, Ю.В. Писаревский<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника»

Метод малоуглового рентгеновского рассеяния, или сокращенно МУРР, является на сегодняшний день одним из наиболее востребованных структурных методов. Он может применяться для исследования белков, структур ДНК/РНК, липидных структур, наноструктур и их комплексов и прочих функциональных материалов, а основным его преимуществом является возможность исследования вещества в его нативном состоянии, то есть в том, в котором оно функционирует в естественной среде.

Станция «БиоМУР» для исследований вещества методом малоуглового рентгеновского рассеяния установлена на Курчатовском источнике синхротронного излучения на поворотном магните. На станции используется треугольный монохроматор из монокристалла Si (111) с апертурой 10 x 4 мм и рентгеновское зеркало полного внешнего отражения длиной 1000 мм. Длина волны на станции 0.1445 нм, минимальный размер сфокусированного на детекторе пучка 480 x 260 мкм, поток фотонов на образце  $1.86 \times 10^{10}$  фот/с. Оптическая схема станции оптимизирована с целью расширения ее функционала и повышения качества проведения экспериментов. Для уменьшения фонового рассеяния были установлены нерассеивающие щели, а вакуумные окна были заменены с 15-микронного майлара на 40-микронную слюду, в результате соотношение сигнал/шум улучшилось в 3.5 раза. Спроектированы и изготовлены новые держатели образцов, позволяющие одновременно размещать до 5 жидких образцов с возможностью термостатирования в диапазоне от -30 до +90 градусов и до 20 образцов произвольной формы с возможностью точного позиционирования на пучке. Помимо стандартных капилляров, доступно проведение экспериментов в микрофлюидной ячейке, что позволяет исследовать динамику процессов в жидкостях.

Многофункциональность станции и ее пригодность к исследованиям образцов различного типа и фазового состояния показывают проведенные исследования механизмов образования дефектов в пленках полилактида при растяжении, а также динамики процесса олигомеризации лизоцима в предкристаллизационном состоянии [1].

[1] M.A. Marchenkova, P.V. Konarev, G.S. Peters, et al., Crystals 13.6 (2023): 938

# ИЗУЧЕНИЕ КОНФОРМАЦИОННОГО РАЗНООБРАЗИЯ ОЛИГОПЕПТИДАЗЫ В МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА, МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

**Д.Е. Петренко<sup>1</sup>, Г.С. Петерс<sup>1</sup>, Ю.А. Гапонов<sup>1</sup>, В.И. Тимофеев<sup>1,2,3</sup>, Т.В. Ракитина<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Институт биоорганической химии имени акад.  
М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

<sup>3</sup>Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова  
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Олигопептидазы В (OpВ) – это сериновые пептидазы, найденные в бактериях и протозойных паразитах, которые являются патогенными факторами соответствующих инфекций. OpВ состоят из двух доменов, соединенных шарнирными пептидами, придающими доменам осевую подвижность. Сравнительный анализ подвижности доменов является основой изучения каталитической активности фермента и поиска путей её ингибирования. Ранее методом рентгеноструктурного анализа (РСА) было установлено, что OpВ имеют несколько конформаций [1]. Конформационная изменчивость OpВ не достаточно изучена.

Объект нашего исследования – OpВ из бактерии *Serratia proteamaculans* (PSP). Структурные исследования проводили на синхротронном источнике НИИЦ «Курчатовский институт» методами РСА и малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Были получены кристаллические структуры PSP в новой (смешанной) конформации, сочетающей высокую степень близости доменов с разобранной каталитической триадой (например, PDB ID 7ZJZ). Методами МУРР и MD моделирования показано, что в растворе PSP радиус инерции молекулы  $R_g$  и расстояние между центрами масс доменов больше по сравнению с конформацией в кристалле: в растворе домены молекулы раскрываются, трансформируясь в открытую конформацию молекулы. Рентгеновский эксперимент проводили на станции БиоМУР, МД эксперимент – при частичной поддержке РФФИ (грант №21-74-20154, <https://rscf.ru/project/21-74-20154/>)

[1] D.E. Petrenko, V.I. Timofeev, et al., *Biology* 10, 1021 (2021).

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВАЛЕНТНОГО СОСТОЯНИЯ УРАНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ XANES СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ПРОГНОЗА МИГРАЦИИ ТЕХНОГЕННОГО УРАНА В УСЛОВИЯХ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Т.Р. Полякова<sup>1</sup>, А.Л. Тригуб<sup>2</sup>, И.Э. Власова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Определение степени окисления урана в радиоактивно загрязненных объектах является важным для установления источника уранового загрязнения и условий его образования. Особой формой существования урана в условиях окружающей среды являются «горячие» частицы. XANES спектроскопия является неразрушающим методом определения степени окисления урана, что позволяет сохранить его форму в процессе анализа. Детальное изучение урановых микрочастиц позволит получить информацию о поведении различных радионуклидов, содержащихся в «горячих» частицах, в условиях окружающей среды и, следовательно, оценить риск в долгосрочной перспективе.

Для изучения урановых «горячих» частиц были синтезированы и охарактеризованы с использованием спектроскопии КР и рентгеновской дифракции оксиды урана:  $\text{UO}_2$ ,  $\text{UO}_{2,05}$ ,  $\text{UO}_{2,1}$ ,  $\text{UO}_{2,15}$ ,  $\text{UO}_{2,2}$ ,  $\text{U}_4\text{O}_9$ ,  $\text{U}_3\text{O}_8$ ,  $\text{UO}_3$ ; гидрат двойного сульфата цезия-урана (III) и гидрат силиката уранила-цезия. Полученные оксиды использовались как образцы сравнения при определении степени окисления урана в Чернобыльских топливных урановых «горячих» частицах при помощи XANES спектроскопии. Спектры были зарегистрированы на станции СТМ Курчатовского источника синхротронного излучения, НИЦ «Курчатовский институт».

Определены степени окисления урана в Чернобыльских «горячих» частицах (рис.1А, Б). Сдвиг пика поглощения для соединения трехвалентного урана (рис.1В) свидетельствовал о том, что данную форму урана возможно стабилизировать в лабораторных условиях и зарегистрировать спектр хорошего качества.

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект №19-73-20051.

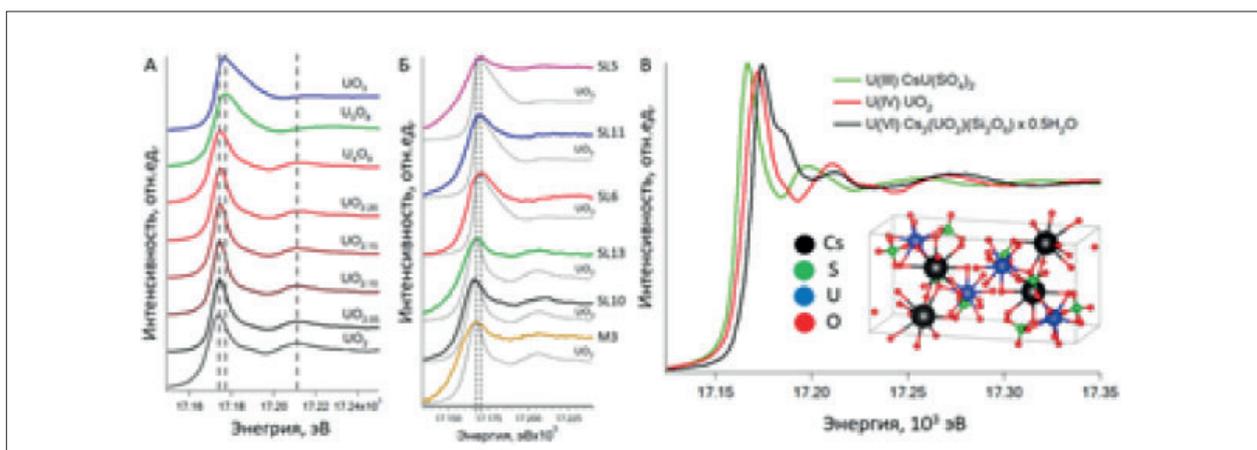


Рис. 1. XANES спектры на  $L_3$  крае урана:

А) оксидов урана с разной степенью окисления;

Б) урановых «горячих» частиц в сравнении со спектрами оксидов урана;

В) соли трехвалентного урана в сравнении со спектром диоксида урана и соли уранила

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $\text{ErNi}_{5-x}\text{Cu}_x$ ( $x = 0, 1, 2$ ) МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Е.А. Пономарева<sup>1</sup>, В.И. Гребенников<sup>1,2</sup>, А.Г. Кучин<sup>1,3</sup>, Т.В. Кузнецова<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>ИФМ УрО РАН

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «Уральский государственный университет путей сообщения»

<sup>3</sup>ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Редкоземельные интерметаллиды  $\text{RNi}_5$  (R – редкоземельный элемент) представляют большой интерес для исследований благодаря своим магнитным свойствам и особенностям электронной структуры. Уникальные характеристики позволяют рассматривать их в качестве перспективных функциональных материалов, магнитокалорических приложений и материалов для хранения атомарного водорода [1–3]. При замещении Ni атомами *d*- или *p*- металлов наблюдается изменение физических свойств соединений. Соединения  $\text{ErNi}_{5-x}\text{Cu}_x$  ( $x = 0, 1, 2$ ) имеют гексагональную кристаллическую структуру типа  $\text{CaCu}_5$  (пространственная группа  $R6/mmm$ ). Наличие магнитных редкоземельных ионов приводит к появлению магнитных моментов в подрешетке Ni. Появление второго переходного металла (Cu) в составе интерметаллида, приводит к уменьшению температуры Кюри, при этом кристаллическая структура не меняется.

Целью данной работы является исследование *d*- и *f*- состояний элементов, а также их влияние на формирование электронной структуры редкоземельных интерметаллидов  $\text{ErNi}_{5-x}\text{Cu}_x$  ( $x = 0, 1, 2$ ). Используемый метод резонансной фотоэмиссионной спектроскопии позволяет выделить вклады элементов соединения в валентную зону (ВЗ). Измерение резонансных фотоэмиссионных спектров проводилось с использованием синхротронного излучения. В результате работы установлены основные закономерности формирования электронной структуры при частичном замещении медью атомов никеля. Исследована зависимость формы спектров ВЗ от изменения энергии фотонов вблизи краев поглощения внутренних уровней Er, Ni, Cu в соединениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №23-72-00067)

[1] F. Kayzel, Magnetic and Thermodynamic Properties of  $\text{RNi}_5$  Compounds, Thesis, Amsterdam (1997).

[2] E. Burzo, S.G. Chiuzebaian, et. Al. J. Phys.: Condens. Matter. 12, 5897 (2000).

[3] B. Sakintuna, F. Lamari-Darkrim, M. Hirscher, Int. J. Hydrogen Energy. 32, 1121 (2007).

# ТЕРМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ $\text{CuZrSe}_2$ И $\text{CuCrSe}_2$

**М.С. Постников<sup>1</sup>, А.С. Шкварин<sup>1</sup>, А.А. Титов<sup>1</sup>, Е.Г. Шкварина<sup>1</sup>, А.Н. Титов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН*

Мультиферроидные магнитоэлектрические материалы, которые одновременно проявляют сегнетоэлектричество и ферромагнетизм, стимулировали резко возросшее количество исследовательских работ в связи с их научным интересом и значительными технологическими перспективами в новых многофункциональных устройствах. При сосуществовании нескольких параметров порядка в мультиферроиках магнитоэлектрическая связь может использоваться в новых типах памяти.

Одним из таких материалов может являться  $\text{CuCrSe}_2$ . Его структуру, схожую со структурой де-лафоссита ( $\text{CuCrO}_2$ ), можно описать как решётку, состоящую из слоёв  $\text{CrSe}_2$ , интеркалированную медью. Нами было обнаружено соединение  $\text{CuZrSe}_2$ , структура которого при комнатной температуре совпадает со структурой  $\text{CuCrSe}_2$ . А при охлаждении до 150К  $\text{CuZrSe}_2$  переходит в нецентросимметричную фазу.

Образцы  $\text{CuZrSe}_2$  и  $\text{CuCrSe}_2$  синтезированы методом твердофазной реакции из простых элементов.

В литературе отсутствуют данные по фазовым диаграммам в данных системах. Поэтому была поставлена цель, изучить фазовую диаграмму при нагреве *in situ*. Эксперимент по изучению фазовых диаграмм при нагреве *in situ* был произведен на линии MCX, Elettra Synchrotron. Нагрев производился от комнатной температуры до 1000°C с интервалом 50°C. Установлено, что в образце  $\text{CuZrSe}_2$  при температурах от 25 до 350°C устойчива фаза с кристаллической решеткой  $\text{P}\bar{3}\text{m}1$ , при дальнейшем повышении температуры происходит распад основной фазы на  $\text{ZrSe}_3$  и  $\text{Cu}_2\text{Se}$  [1]. Для образца  $\text{CuCrSe}_2$  определена температура возникновения шпинельной фазы  $\text{CuCr}_2\text{Se}_4$  и обогащению основной фазы медью –  $\text{Cu}_{1+x}\text{CrSe}_2$ , выполнено полнопрофильное уточнение кристаллической структуры. Построен фрагмент фазовой диаграммы для  $\text{CuCrSe}_2$  в диапазоне температур 25–1000°C.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №22-13-00361).

[1] E.G. Shkvarina et al., Thermal stability of the  $\text{CuZrSe}_2$  // Journal of Solid State Chemistry, 2023, Vol. 328. P. 124307.

# СТАНЦИЯ «МИКРОФОКУС» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Г.В. Пруцков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Станция «Микрофокус» Курчатовского источника синхротронного излучения специализируется на проведении исследований, требующих высокой локализации области взаимодействия синхротронного излучения с изучаемыми объектами за счет фокусировки фотонного пучка. Станция позволяет решать задачи в области материаловедения, микроэлектроники, археологии и др., проводить аттестацию элементов рентгеновской оптики.

В настоящее время на станции поставлены следующие экспериментальные методики: рентгеновская микродифракция (uXRD), рентгеновская микрофлуоресценция (uXRF), рентгеновская флуоресценция в геометрии скользящего падения (GIXRF) или выхода (GEXRF).

Оптическая схема станции представлена на рис. 1. В качестве конечного фокусирующего элемента используются составные предломляющие линзы (СПЛ) на основе Ве и/или Al, а также поликапиллярные рентгеновские линзы. Минимальный размер фокусированного пятна, экспериментально полученный на на станции, составлял 7 x 7 мкм (Ве + Al СПЛ, E = 25 кэВ).

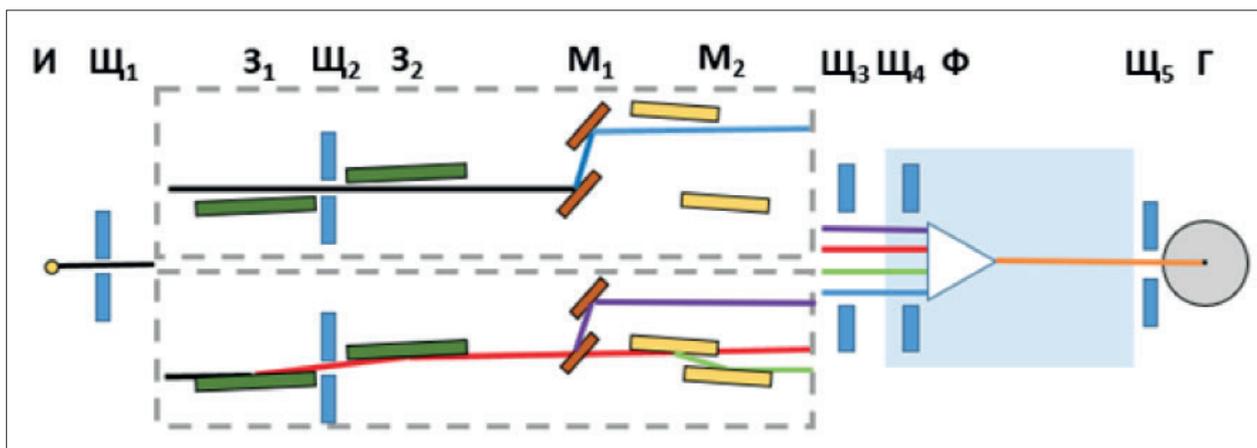


Рис. 1. Оптическая схема станции «Микрофокус».

И – источник (поворотный магнит); Щ<sub>1</sub>–Щ<sub>5</sub> – рентгеновские щели; З<sub>1</sub>, З<sub>2</sub> – рентгеновские зеркала; М<sub>1</sub> – блок кристаллических монохроматоров; М<sub>2</sub> – блок многослойных монохроматоров; Ф – конечный фокусирующий элемент (рентгеновская линза); Г – гониометр. Линиями разных цветов показаны различные варианты подготовки рентгеновского пучка. Фокусировка возможна как в пределах оптического стола, так и в центр многокрусного гониометра (Г)

# СТАНЦИЯ НКР – НАНОСИСТЕМЫ И КОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ НА КУРЧАТОВСКОМ ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Ю.Л. Репченко<sup>1</sup>, Р.А.Баулин<sup>1,2</sup>, Э. Х. Мухамеджанов<sup>1</sup>, С. Н. Якунин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

В докладе будет впервые представлен проект новой экспериментальной станции на вставном устройстве модернизированного Курчатовского источника синхротронного излучения. Станция НКР спроектирована для реализации набора недоступных ранее синхротронных методов, основанных на использовании когерентных свойств излучения, субмикронных и поляризованных пучков. Комбинация свойств нового синхротронного источника, ондулятора и оптики экспериментальной станции позволит реализовать методы: когерентного дифракционного имиджинга (CDI), птайхографии, безлинзовой Фурье-микроскопии (XFM). Практический упор будет сделан на методики, связанные с дихроизмами поляризованного синхронного излучения: Рентгеновский Магнитный Круговой и Линейный дихроизм (XMCD, XMLD), Рентгеновский Естественный Круговой дихроизм (XNCD), Рентгеновская Резонансная Магнитная Рефлектометрия и Дифракция (XRMR и XMD). Объектами изучения станут монокристаллы, тонкие плёнки и многослойные структуры, содержащие магнитные атомы и обладающими интересными свойствами магнитного упорядочения, спин-орбитальных межатомных и межслойных взаимодействий. К научным задачам, возможных к реализации на станции, относятся и исследования структуры и состава аморфных и неупорядоченных объектов, включая стекла, полимеры, дефекты в кристаллах, квантовые точки и нити, биологические ткани и целые клетки, органеллы, некоторые вирусы, молекулы белков, которые сложно кристаллизовать и др.

Источником излучения будет короткопериодный ондулятор с варьируемой амплитудой магнитного поля и спектральным диапазоном 1.6–20 кэВ в районе 1,3,5 и 7 ондуляторной гармонике. Двухкристальный монохроматор с двумя наборами кристаллов Si (111) и InAs(111) обеспечит спектральное разрешение  $\Delta\lambda/\lambda = 1 \times 10^{-4}$ . Трансфокатор со сменным количеством составных линз обеспечит работу в зависимости от задачи с плоскопараллельным или сфокусированным пучком размеров до 500 x 36 мкм<sup>2</sup>. Система фазовых кристаллических пластинок обеспечит работу с излучением вертикальной или горизонтальной линейной поляризации, а также правой или левой круговой поляризации. На первом этапе планируется к реализации инструмент на основе 6-ти кругового дифрактометра с устанавливаемым сверхпроводящим магнитом с полем до 5 Тл и системой охлаждения образца до 4К.

# СИНХРОТРОННАЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СТАНЦИЯ «ЛЕНГМЮР»

Н.Н. Новикова<sup>1</sup>, С.Н. Якунин<sup>1</sup>, А.В. Рогачев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Станция «Ленгмюр» позволяет получать информацию об элементном составе, локальном окружении, структурной организации и распределении элементов по глубине в биоорганических системах формирующихся в результате самоорганизации молекул на межфазной границе жидкость/воздух. Главная особенность станции – рентгенооптическая схема, обеспечивающая отклонение пучка СИ для проведения углового сканирования на жидкости. Ключевым узлом станции «Ленгмюр» является блок образца – ленгмюровская ванна с контролируемым газовым окружением и температурой субфазы.

Станция реализует широкий спектр поверхностно-чувствительных методик: стоячие рентгеновские волны (XSW), дифракция в геометрии скользящего падения (GID), малоугловое рентгеновское рассеяние в скользящей геометрии (GISAXS), рентгеновская спектроскопия поглощения (XANES/EXAFS) в скользящей геометрии.

На станции впервые были реализованы исследования ленгмюровских пленок методом XSW, моделей легочного сурфактанта и белковых пленок методом EXAFS, зафиксировано явление формирования однотипных центров связывания цинка в неродственных белках.

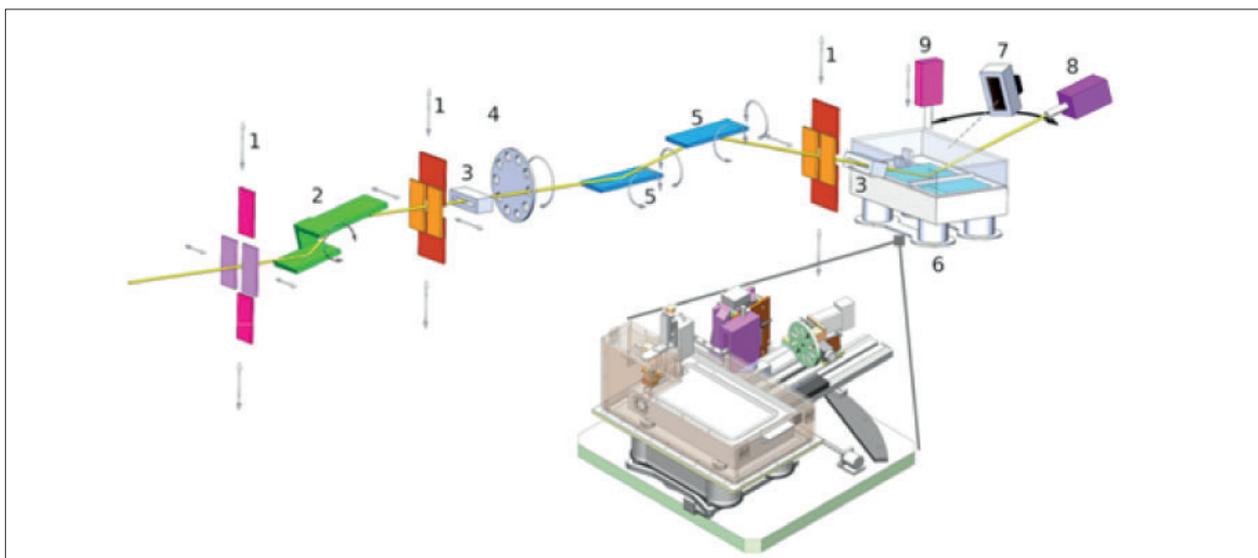


Рис. 1. Принципиальная схема станции «Ленгмюр» КИСИ.

1 – рентгеновские щели, 2 – кристалл монохроматор прорезного типа, 3 – мониторы пучка, 4 – аттенюатор пучка, 5 – рентгеновские зеркала полного внешнего отражения, 6 – блок образца, 7 – щели Соллера с линейным детектором, 8 – точечный рентгеновский детектор, 9 – энергодисперсионный рентгеновский детектор

# КОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ АЛМАЗА ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Е. Рубцова<sup>1</sup>, И. Каменских<sup>1</sup>, И. Шпиньков<sup>1</sup>, В. Седов<sup>2</sup>,  
С. Кузнецов<sup>2</sup>, В. Ральченко<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова*

<sup>2</sup>*Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН*

Источники электромагнитного излучения нового поколения, такие как рентгеновские лазеры на свободных электронах, открывают ранее недоступные возможности для научных исследований. В то же время для них требуются материалы для мониторинга пучка. В качестве возможного решения были предложены композитные экраны, состоящие из алмаза с внедренными наночастицами, содержащими редкоземельные элементы (РЗЭ). На данный момент были проведены исследования нескольких композитов с наночастицами: NaGdF<sub>4</sub>:Eu [1], YAG:Ce [2], которые продемонстрировали хорошие люминесцентные показатели при возбуждении рентгеновским излучением.

Спектр возбуждения люминесценции церия на К-краю поглощения иттрия (~17 кэВ) композита с наночастицами YAG:Ce был измерен на станции P23 центра синхротронных исследований DESY. В нем наблюдались характерные для EXAFS осцилляции, которые также воспроизводились для люминесценции центра кремний-вакансия, или SiV, характерного для CVD алмаза. Подобная корреляция свидетельствует о передаче энергии от наночастиц алмазной матрице, причем осуществляется она вторичными электронами.

Обнаруженный эффект позволяет создавать материалы, в которых рентгеновское поглощение (его спектральная область и интенсивность) при энергиях возбуждения, где алмаз поглощает слабо, задается материалом и количеством наночастиц, а высвечивание осуществляется центрами люминесценции алмаза. Подготовленные новые образцы алмаза с наночастицами могут быть исследованы на источнике СИ Курчатовского института.

Работа выполняется при поддержке гранта РФФИ №21-12-00219.

[1] V. Sedov, S. Kouznetsov, A. Martyanov, et al., ACS Appl. Nano Matter, 3, 1324–1331 (2020).

[2] V. Sedov, S. Kouznetsov, I. Kamenskikh, et al., Carbon, 174, 52-58 (2021).

# НЕЙТРОНОГРАФИЯ МАГНИТНОЙ СПИРАЛИ МОНОКРИСТАЛЛА ГЕКСАФЕРРИТА $\text{BaCo}_2\text{Ti}_2\text{Fe}_8\text{O}_{19}$ ТИПА М В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**Р.А. Салыков**<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт Ядерных Исследований РАН*

<sup>2</sup>*Институт Физики Высоких Давлений РАН*

Гексаферриты типа М продолжают вызывать научный и практический интерес [1]. Проведены нейтронографические исследования спиральной магнитной структуры монокристалла соединения  $\text{BaCo}_2\text{Ti}_2\text{Fe}_8\text{O}_{19}$  с гексагональной структурой типа М в широком интервале температур в магнитных полях до 1,8Т (18кэ) с использованием электромагнита с горизонтальными полюсами. Монокристалл имел вид шестигранной призмы, высотой до 3 мм с хорошо выраженными базисными гранями {0001}. Базисная плоскость монокристалла была ориентирована параллельно плоскости полюсов электромагнита и соответственно ось с вдоль магнитного поля. Нейтронографические исследования проводились методом обдува монокристалла холодным азотом. Получено, что при 1.8Т внешнего магнитного поля происходит переход от спиральной структуры в базисе в коллинеарную антиферромагнитную структуру, также расположенную в базисе. Получена магнитная фазовая диаграмма (МФД-НТ).

Проведенные нейтронографические измерения до 30 кбар изменения периода магнитной спирали не показали, из-за очень малой деформации.

Нужно отметить, что методика с применением электромагнита и двухкоординатного детектора может быть в ряде нейтронографических экспериментов простой и экономичной.

[1] А.М. Балбашов, В.Ю. Иванов, А.А. Мухин, и др. Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 7, с. 542–549 с (2015).

# ПРИМЕНЕНИЕ ЭФФЕКТА КОССЕЛЯ ДЛЯ СТРУКТУРНОЙ ДИАГНОСТИКИ ПЕРИОДИЧЕСКИХ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСИСТЕМ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ВРЕМЯРАЗРЕШАЮЩИХ ИССЛЕДОВАНИЙ НА ИСТОЧНИКАХ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЫСОКОЙ ЯРКОСТЬЮ

**А.И. Сафонов<sup>1</sup>, К.В. Николаев<sup>1</sup>, И.А. Субботин<sup>1</sup>, С.Н. Якунин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

Наиболее прогрессивным подходом к проведению исследований, в том числе с временным разрешением, является съемка так называемого «рентгеновского кино». Основной идеей данного подхода является «исследование за один кадр» без необходимости перестройки параметров экспериментальной схемы (углы, энергии). Важной методической задачей является развитие новых экспериментальных методов, позволяющих получать информацию о структурных свойствах объектов исследования без сканирования.

Используя оптический принцип взаимности, предлагается развить новый класс методов СРВ с геометрией «нормальное падение – скользящий выход флуоресценции», в котором сложная структура флуоресцентного сигнала, измеренная в скользящих углах (аналог эффекта Косселя), используется для определения профилей распределения атомов в слоистых системах или атомных позиций в кристаллической решетке.

Использование сверхярких источников синхротронного излучения с микро- и нано-фокусировкой позволяет максимально локализовать метод для исследования малых (наноразмерных) объектов и проведения трехмерной диагностики при картировании объектов с требуемым разрешением.

Разработанный алгоритм, реализующий позиционно-чувствительный энергодисперсионный анализатор, сделал возможным проведение таких экспериментов с использованием двумерных рентгеновских ПЗС-камер.

Тестирование экспериментальной схемы осуществлялось на слоистых системах W-Ti-W. Показаны результаты спектрально-селективных исследований в бессканирующем режиме в геометрии «нормальное падение – скользящий выход флуоресценции», эквивалентные данным метода СРВ в стандартной геометрии скользящего падения. Мультиспектральный анализ волновых полей флуоресцентных линий, имеющих различные распределения, может быть использован для восстановления структурных параметров.

# ОБ ИНФОРМАТИВНОСТИ СПЕКТРОСКОПИИ ПРОДУКТОВ ЭРОЗИИ ПЕРВОЙ СТЕНКИ ТЕРМОЯДЕРНЫХ УСТАНОВОК НА ОСНОВЕ ВОЛЬФРАМА И УГЛЕРОДА

**Н.Ю. Свечников<sup>1</sup>, В.Г. Станкевич<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

Показана возможность исследования спектроскопическими методами электронной структуры продуктов эрозии первой стенки токамака из вольфрам-содержащих и углеродных материалов, которые поглощают дорогостоящее термоядерное (ТЯ) топливо H, D, T в результате адсорбции и хемосорбции. Углерод может присутствовать в токамаках с металлической первой стенкой в виде примесей, образованных из спектра остаточных газов  $\text{CO}_2$ , CO,  $\text{C}_x\text{H}_y$  или после проведенных ранее исследований с углерод-содержащими материалами [1]. Актуальность работы также обусловлена сооружением ТЯ реактора JT-60SA (в поддержку проектов ИТЭР и ДЕМО), который запустят первоначально с углеродными стенками [2]. Рассмотрены наиболее используемые на практике спектроскопические методы, такие как рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, ИК-спектроскопия и комбинационное рассеяние света. В качестве примеров показаны результаты следующих исследований продуктов эрозии вольфрама и графита: 1) смешанных пленок  $\text{CH}_x\text{-Me}$  (примеси Me = W, Fe и др.) на подложке Si(100), полученных на сильноточном плазменном ускорителе КСПУ-Т (ТРИНИТИ, г. Троицк) при облучении вольфрамовой мишени пучком водородной плазмы; 2) углеродно-дейтериевых пленок  $\text{CD}_x$  ( $x = \text{D/C} \approx 0.3 - 0.8$ ) в виде хлопьев толщиной  $\sim 30$  мк из дейтериевых плазменных разрядов токамака T-10 с графитовым лимитером [3].

Отмечено, что продукты эрозии, по существу, являются паспортом работы ТЯ установок, позволяющих прогнозировать и предотвращать возможные аварийные ситуации.

[1] P.S. Krstica, J.P. Allain, et al., Matter. Radiat. Extremes, 3, 165 (2018).

[2] G. Giruzzi, M. Yoshida, et al., Plasma Phys. Control. Fusion, 62, 014009 (2020).

[3] V.G. Stankevich, N.Y. Svechnikov, B.N. Kolbasov. Symmetry, 15, 623 (2023).

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФОТОННОГО МОНИТОРА ПОЛОЖЕНИЯ ПУЧКА ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ПОЛОЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В НАКОПИТЕЛЕ «СИБИРЬ-2»

**А.А. Сенкевич<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатowskiй институт»

<sup>2</sup>МГТУ имени Н.Э. Баумана

В рамках программы развития синхротронно-нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры в Российской Федерации будет реализован проект по созданию и модернизации ряда установок, являющихся источником синхротронного излучения (СИ). Так как новые источники СИ будут обладать меньшими эмиттансами [1] и расходимостью фотонных пучков, чем на существующих установках, использование высокоточных систем диагностики параметров электронного и фотонного пучков становится как никогда актуальным. На практике одним из наиболее важных параметров фотонного пучка является его пространственное положение, для определения которого используются мониторы положения пучка (ВРМ), чему посвящена настоящая работа.

Для получения корректных данных с ВРМ с помощью результатов трассировки фотонного пучка определен оптимальный режим работы датчика. Аналитически рассчитана его чувствительность к смещению положения фотонного пучка. Произведена регистрация и оцифровка сигнала. По результатам измерений сделан вывод о необходимости коррекции электронного пучка. Разработано приложение, позволяющее пользователю отслеживать положение электронного пучка и передавать запрос о необходимости коррекции через базу данных синхротронного накопителя. Полученные результаты и созданные алгоритмы применимы как для существующих, так и для будущих источников СИ, использующие фотонные мониторы положения пучка ножевого типа.

[1] В.Н. Корчуганов, А.Г. Валентинов, С.М. Полозов, А.С. Смыгачева, В.А. Ушаков, Е.А. Фомин, М.В. Ковальчук. ПРОЕКТ КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ТРЕТЬЕГО ПОКОЛЕНИЯ. Кристаллография, Том 67, Номер 5, 2022, 735–741.

# СТАНЦИЯ РКФМ. НОВЫЙ МЕТОД ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАЗМЕРА ПУЧКА В ФОКУСЕ ДЛЯ СОСТАВНОЙ ПРЕЛОМЛЯЮЩЕЙ ЛИНЗЫ

**А.Ю. Серегин<sup>1,2</sup>, М.С. Фоломешкин<sup>1,2</sup>, В.Г. Кон<sup>1,2</sup>, Ю.А. Волковский<sup>1,2</sup>,  
П.А. Просеков<sup>1,2</sup>, В.А. Юнкин<sup>3</sup>, Д.А. Зверев<sup>4</sup>, А.А. Баранников<sup>4</sup>, А.А. Снигирев<sup>4</sup>,  
Ю.В. Писаревский<sup>1,2</sup>, А.Е. Благов<sup>1,2</sup>, М.В. Ковальчук<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

<sup>3</sup>ИПТМ РАН

<sup>4</sup>БФУ имени И. Канта

Для оценки эффективности фокусировки составных преломляющих линз (СПЛ) широко используются методы ножевого сканирования. Однако данные методы сопряжены с рядом технических трудностей, когда возникает необходимость измерения пучков размером менее 100 нм, что особенно актуально в связи с реализацией проекта источника синхротронного источника 4-го поколения с рентгеновским лазером на свободных электронах «СИЛА» [1]. Кроме того, использование методов ножевого сканирования для определения предельного размера пучка в фокусе подразумевает выполнение условия пространственной когерентности первичного пучка СИ, то есть длина когерентности должна быть больше апертуры СПЛ. В противном случае, в эксперименте измеряется размер пучка, увеличенный по сравнению с теоретическим значением за счет конечного размера источника СИ. В настоящей работе предложен новый метод [2] оценки предела фокусировки с помощью СПЛ, заключающийся в измерении угловой расходимости сфокусированного пучка синхротронного излучения (СИ) путем регистрации дифракционной кривой качания идеального монокристалла. Измеренный таким образом размер углового спектра может быть пересчитан в размер пучка в фокусе на основании аналитической теории фокусировки с помощью СПЛ.

В качестве исследуемых образцов использовали планарные СПЛ с апертурой 50 мкм из кремния, изготовленные в виде чипа из нескольких параллельно расположенных рядов линз. Исследования проводили на станции «Рентгеновская кристаллография и физическое материаловедение» (РКФМ) Курчатовского комплекса синхротронного излучения.

Полученные результаты показали, что предложенный метод позволяет получать информацию о предельной фокусировке, определяемой структурой используемой СПЛ и не зависящей от конечного размера источника СИ.

[1] М.В. Ковальчук, А.Е. Благов, О.С. Нарайкин и др. Кристаллография. 67, 5 (2022).

[2] М.С. Фоломешкин, В.Г. Кон, А.Ю. Серегин и др. Кристаллография. 68, 1 (2023).

# РАЗРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО СТЕНДА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ НА РЕАКТОРЕ ИР-8

**Е.О. Серов<sup>1</sup>, А.И. Калюканов<sup>1</sup>, В.И. Боднарчук<sup>1</sup>, С.С. Агафонов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

Использование пучков поляризованных нейтронов в исследованиях конденсированных сред может существенно расширить круг решаемых задач на станциях нейтронного рассеяния. Практически все традиционные методики (дифракция, МУРН, рефлектометрия и др.), реализуемые в мировых нейтронных центрах, имеют версии с использованием поляризованного пучка.

До настоящего времени в рамках нейтронографического комплекса на реакторе ИР-8 не было установок с поляризованными нейтронами. Для отработки методики работы с нейтронной поляризацией на ГЭК-5 реактора ИР-8 на базе установки АТОС планируется создать стенд, на котором можно будет получать пучок поляризованных нейтронов и отладить методы работы с ним. Стенд представляет собой оптический стол, на котором должны быть размещены основные узлы, обеспечивающие получение поляризованного пучка, устройства управления поляризацией и детектор. В течение 2023 г. монтажные работы по созданию стенда должны быть завершены и проведены первые тестовые эксперименты.

[1] Ю.В. Никитенко, В.Г. Сыромятников. Рефлектометрия поляризованных нейтронов. Москва : Физматлит, 2013. – 218, 1 с.

# ПРИМЕНЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ ВЫБОРА СОЛЕЙ И РАСТВОРОВ $RE(NO_3)_3 \cdot xH_2O$ ( $RE = La-Lu, Y, Sc$ ) С ОПТИМАЛЬНЫМИ СТРУКТУРНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ И БИОЦИДНЫМИ СВОЙСТВАМИ

**Е.А. Сетяева<sup>1</sup>, А.А. Глушко<sup>2</sup>, Г.М. Кузьмичева<sup>1</sup>, А.А. Незнанов<sup>2</sup>,  
Р.П. Терехова<sup>3</sup>, Р.Д. Светогоров<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «МИРЭА-Российский технологический университет»

<sup>2</sup>НИУ «Высшая школа экономики»

<sup>3</sup>ФГБУ «НМИЦ хирургии имени А.В. Вишневского»

<sup>4</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Соединения с редкоземельными элементами (RE) обладают биоцидными, антиоксидантными, противовоспалительными свойствами [1], что делает их перспективными для разработки на их основе новых эффективных препаратов. Для объяснения механизма действия RE и выбора соединений с оптимальными характеристиками необходимо установление связей между данными о соединениях и их компонентах, составом и строением микроорганизмов, с одной стороны, и биоцидными свойствами, с другой. Эту задачу наиболее эффективно решать с применением возможностей ИТ, что и явилось мотивацией представленной работы.

В вычислениях использованы ансамблевые модели на основе решающих деревьев [2] (RandomForest, GradientBoosting, XGBoost), которые хорошо объяснимы и интерпретируемы и позволяют легко выявить важность признаков [3]. Для каждой модели подобран набор гиперпараметров и оценена точность прогнозирования с помощью метрик MAE и R2. В результате расчетов найден набор характеристик (признаков) из 6-ти для солей  $RE(NO_3)_3 \cdot xH_2O$  с  $RE = La-Lu, Y, Sc$  и Ca и из 6-ти для их растворов, включая три шкалы электроотрицательности, которые оказывают существенное влияние на зону задержки роста (результат) 7-ми штаммов бактерий и 3-х грибов: электроотрицательность RE по системе Полинга и кристаллическая структура (соли); pH, константа устойчивости нитратных комплексов, электроотрицательность по системе Оганова (растворы). Для анализа зависимостей между признаками растворов использована модель XGBoost, которая устойчива к пропускам в данных. Самыми влиятельными признаками микроорганизмов оказались максимальная и минимальная толщина клеточных стенок бактерий и их отнесение к грамположительным или грамотрицательным. Представлен набор солей  $RE(NO_3)_3 \cdot xH_2O$ , к которым наиболее чувствительны бактерии и грибы.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов на выполнение проектов Министерства науки и высшего образования РФ №0706-2020-0026.

[1] В.З. Бондаренко, О.Д. Складов и др., Ветеринария Кубани. 4 (2018).

[2] F. Oviedo, J.L. Ferres et. al. Accounts of Materials Research. 3(6), 597–607 (2022).

[3] X. Zhong, B. Gallagher et. al. NPJ Computational Materials 8 (2022).

# ВЗАИМОПРОНИКАЮЩИЕ ПОЛИМЕРНЫЕ СЕТКИ НА ОСНОВЕ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ И ПОЛИ-1-ВИНИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛА: ИЗУЧЕНИЕ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТОДАМИ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

**Р.Ю. Смыслов<sup>1,2</sup>, Г.П. Копица<sup>2</sup>, А.И. Емельянов<sup>3</sup>, К.В. Ездакова<sup>2</sup>,  
Ю.Е. Горшкова<sup>4</sup>, С.А. Коржова<sup>3</sup>, Н.В. Цвигун<sup>5</sup>, А.Е. Соколов<sup>2</sup>,  
А.К. Хрипунов<sup>1</sup>, А.Е. Баранчиков<sup>6</sup>**

<sup>1</sup>*Институт высокомолекулярных соединений РАН*

<sup>2</sup>*Петербургский институт ядерной физики  
имени Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>3</sup>*Иркутский институт химии имени А.Е. Фаворского СО РАН*

<sup>4</sup>*Лаборатория Нейтронной Физики имени И.М. Франка,  
Объединенный Институт Ядерных Исследований*

<sup>5</sup>*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

<sup>6</sup>*Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН*

Синтезированы новые композиционные гидрогели (КГ) на основе бактериальной целлюлозы (БЦ) и поли-1-винил-1,2,4-триазола (ПВТ), допированного ортофосфорной кислотой (ОФК), представляющие собой взаимопроникающие полимерные сетки (ВПС). Синтез подобных гидрогелей является продолжением работ по получению гибридных органо-неорганических композитных материалов, включающих ионы меди [1].

Исследование надмолекулярной структуры (НМС) как нативной целлюлозы, продуцируемой штаммом *Komagataeibacter rhaeticus*, так и КГ на основе БЦ, содержащей комплекс ПВТ/ОФК, проводилось на мезоскопическом уровне в широком диапазоне переданного импульса с использованием методов ультра- и классического малоуглового рассеяния нейтронов. Для исследуемых объектов выявлены два иерархических уровня НМС от 1,6 нм до 2,5 мкм. Кроме того, показано, что нативная БЦ имеет корреляционный пик на кривых малоуглового рассеяния при  $0,00124 \text{ \AA}^{-1}$ , причем корреляционная длина  $\xi$  равна примерно 500 нм. Этот мотив сохраняется и в ВПС. Полученные данные позволяют оценить фрактальные размеры, диапазоны самоподобия, дают новую информацию о мезоструктуре БЦ и КГ на её основе. Кроме того, выявлено совпадение НМС с моделью БЦ Брауна, которая ранее была подтверждена результатами Финка [2, 3]. Найденный пик на кривой МУР может служить хорошим ориентиром для проверки «нативности» нано-гель-пленки БЦ при различных видах её обработки. Полученные результаты важны в области нанотехнологии для регенеративной медицины, получения легких материалов, оптоэлектроники и мембранных технологий.

[1] R.Yu. Smyslov, G.P. Kopitsa, et al. *Smart Materials in Medicine* (2022) 3, 382.

[2] R.M. Brown. *J. Macromol. Sci. Part A* (1996) 33, 1345.

[3] H.P. Fink, H.J. Purz, et al. *Macromol. Symp.* (1997) 120, 207.

# СИНХРОТРОННЫЕ ЦЕНТРЫ – СМЕНА ПАРАДИГМЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ: НЕ ТОЛЬКО ДИАГНОСТИКА, НО И РАЗРАБОТКА ПЕРСПЕКТИВНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

А.В. Солдатов<sup>1</sup>, А.А. Гуда<sup>1</sup>, М.А. Солдатов<sup>1</sup>, И.А. Панкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Южный федеральный университет*

Все более сложные задачи, встающие перед исследователями, использующими источники синхротронного излучения, предъявляют все более высокие требования к качеству получаемых данных с одной стороны, а с другой стороны диктуют необходимость перехода ко все более комплексным экспериментам, в том числе с высоким временным разрешением и к экспериментам при реальных технологических условиях (*operando*). Большие Данные, возникающие в таких экспериментах как правило не удается анализировать прямо в ходе эксперимента, что не позволяет контролировать «на лету» условия эксперимента и качество (надежность) самих получаемых на синхротронах больших экспериментальных данных.

В работе показано, что использование технологий искусственного интеллекта (глубокого машинного обучения) позволяет решать задачу анализа больших данных в режиме реального времени и успешно контролировать качество данных непосредственно в ходе комплексных экспериментов на источниках синхротронного излучения последних поколений.

Развитый в ЮФУ подход, позволяющий на основе анализа спектров рентгеновского поглощения получать информацию о параметрах наноразмерной локальной атомной и электронной структур исследуемых материалов, был применен для диагностики интермедиатов и результирующих функциональных материалов, синтезируемых в специализированных микрофлюидных чипах в автономной системе, управляемой на основе технологий искусственного интеллекта.

Разработанная система позволяет существенно увеличить скорость оптимизации параметров синтеза целого ряда стратегически важных классов функциональных материалов. Внедрение подлочных установок позволит изменить и саму парадигму использования центров синхротронного излучения: эта инфраструктура «мега-сайенс» будет использоваться не только для диагностики созданных ранее материалов, но и для экспресс разработки новых функциональных материалов.

Исследование выполнено при поддержке Минобрнауки России (Соглашение №075-15-2021-1363).

# УСТРОЙСТВО ДВУМЕРНОЙ ФОКУСИРОВКИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ПЛАНАРНЫХ КРЕМНИЕВЫХ СОСТАВНЫХ ПРЕЛОМЛЯЮЩИХ ЛИНЗ

**М.Н. Сороковиков<sup>1</sup>, Д.А. Зверев<sup>1</sup>, А.А. Баранников<sup>1</sup>, В.А. Юнкин<sup>2</sup>,  
А.Ю. Серегин<sup>3,4</sup>, Ю.А. Волковский<sup>3,4</sup>, П.А. Просеков<sup>3,4</sup>, А.А. Снигирёв<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*БФУ имени И. Канта*

<sup>2</sup>*ИПТМ РАН*

<sup>3</sup>*НИИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>4</sup>*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

Представленная работа посвящена разработке, изготовлению и испытанию устройства двумерной фокусировки рентгеновского излучения на основе планарных кремниевых составных преломляющих линз (СПЛ) [1, 2]. Предложен новый метод формирования двумерной фокусировки с использованием двух планарных кремниевых СПЛ, расположенных ортогонально друг за другом вдоль оптической оси. Такой подход позволяет фокусировать рентгеновское излучение в вертикальном и горизонтальном направлениях с заданными параметрами (размер фокуса и фокусное расстояние) в широком диапазоне энергий.

Изготовление и юстировка рентгенооптического устройства проводилась на базе УНУ «SynchrotronLike» БФУ им. И. Канта. Двумерная фокусировка рентгеновского излучения с коррекцией астигматизма экспериментально продемонстрирована на исследовательской станции РКФМ «КИСИ–Курчатов». Реализованная возможность коррекции астигматизма оптической системы позволяет существенно улучшить пространственное разрешение сканирующих методов исследования, связанных с асимметрией формы синхротронного источника излучения. Уникальное устройство двумерной фокусировки имеет огромный потенциал практического применения на новых источниках синхротронного излучения.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по гранту №075-15-2021-1362.

[1] A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, B. Lengeler. Nature. V. 384. №6604. 49 (1996).

[2] A. Snigirev, I. Snigireva, M. Grigoriev, V. Yunkin. Advances in X-Ray/EUV Optics and Components II 6705, 670506 (2007).

# РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ В УСЛОВИЯХ ВОЗДЕЙСТВИЯ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

**Н.И. Снегирёв<sup>1,2</sup>, А.Г. Куликов<sup>1,2</sup>, И.С. Любутин<sup>1</sup>, Ф.С. Пиляк<sup>1,2</sup>,  
А.Ю. Серегин<sup>1,2</sup>, С.В. Ягупов<sup>3</sup>, М.Б. Стругацкий<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*ФНИИЦ Кристаллография и фотоника РАН*

<sup>2</sup>*НИИЦ Курчатовский институт*

<sup>3</sup>*ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет»*

В рамках доклада будет обсуждаться влияние магнитной доменной структуры и эффектов поверхностного магнетизма на совершенство кристаллических материалов и их дифракционные характеристики. В качестве модельного объекта для экспериментальных исследований был выбран слабый антиферромагнетик  $\text{FeVO}_3$  из-за существования в нем аномально сильного магнитоупругого взаимодействия. Сконструирована экспериментальная ячейка для рентгенодифракционной диагностики кристаллических материалов в условиях воздействия на них внешних магнитных полей.

Установлено, что магнитная доменная структура и эффекты приповерхностного магнетизма приводят к появлению разупорядоченных областей в кристаллах  $\text{FeVO}_3$  и небольшим изменениям параметров решетки. Это выражается в уширении и/или расщепление узла обратной решетки. Приложение внешнего магнитного поля позволяет улучшить дифракционные характеристики кристаллов  $\text{FeVO}_3$ .

Впервые визуализирована магнитная доменная структура монокристаллов твердых растворов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{VO}_3$ . Установлено, что конфигурация доменных стенок в кристаллах твердых растворов (с малой концентрацией ионов Ga) схожа с конфигурацией в образцах исходной фазы  $\text{FeVO}_3$ . Показано, что приложение даже слабых магнитных полей (порядка нескольких эрстед) достаточно, чтобы существенно уменьшить дифракционный контраст на топограммах образцов, и, соответственно, улучшить степень структурного совершенства кристаллов.

Проведены времяразрешающие эксперименты по наблюдению рентгеновской дифракции на монокристаллах  $\text{FeVO}_3$  под действием переменных магнитных полей. Показана возможность управления параметрами дифракционных характеристик кристалла бората железа в соответствии с законом модуляции внешнего магнитного поля.

Разработанная методика и полученные результаты чрезвычайно важны для практического применения магнитоупорядоченных кристаллов, таких как борат железа  $\text{FeVO}_3$ , в новых высокотехнологичных областях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки в рамках гранта №075-15-2021-1362.

# УСТАНОВЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКОГО 2D СПИН-ПЕРЕМЕННОГО ПОЛИМЕРА $K[Fe(5-Cl-thsa)_2]$

**Н.Г. Спицына<sup>1</sup>, М.А. Благов<sup>1</sup>, А.С. Лобач<sup>1</sup>, В.А. Лазаренко<sup>2</sup>,  
Р.Д. Светогоров<sup>2</sup>, Я.В. Зубавичус<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>ФИЦ ПХФ и МХ РАН

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>ЦКП «СКИФ» ФИЦ «Института катализа СО РАН»

Октаэдрические комплексы Fe(III) с  $3d^5$  электронной конфигурацией на основе тридентатных (ONS) лигандов, обладающие термически индуцированным спиновым переходом, представляют интерес для исследователей в области фундаментальной и прикладной химии. Такие комплексы обладают высокой химической устойчивостью, могут демонстрировать многоступенчатый термоиндуцированный обратимый спиновый переход магнитного центра между значениями спина  $S = 1/2$  (низкоспиновое состояние, НС) и  $S = 5/2$  (высокоспиновое состояние, ВС) с гистерезисом вблизи комнатных температур. Переход из НС в ВС состояние сопровождается увеличением магнитного момента и длин координационных связей Fe(III)-лиганд комплексов. Однако, изучение структурных особенностей осложнено трудностью получения кристаллов, пригодных для РСА. Применение методик с использованием синхротронного излучения открывает большие возможности в этом направлении.

Нами синтезирована и структурно охарактеризована калиевая соль спин-переменного аниона Fe(III) с координационным узлом  $N_2S_2O_2$ :  $K[Fe(5Cl-thsa)_2]$  (1) (5Cl-thsa – тиосемикарбазон 5-хлорсалицилового альдегида) в широком температурном диапазоне [1]. Кристаллическая структура минорного полиморфа 1\* определена РСА на кристалле размером  $0,05 \times 0,03 \times 0,02$  мм с использованием синхротронного излучения в режиме нагрева при 100К, 250К и 300К, параметры координационного узла Fe(III) соответствуют НС (рис. 1).

Результаты исследования поликристаллического образца основного полиморфа 1 методами рентгенофазового анализа, рентгеноабсорбционной спектроскопии XANES/EXAFS помогли установить факт разупорядочения катиона калия по нескольким кристаллографическим позициям при сохранении двумерного мотива упаковки гетерометаллического полимера. Существенные изменения параметров элементарной ячейки 1 в интервале 325–387К, а также структурный фазовый переход  $Pbcn \rightarrow P2_{1/n}$  при ~387К указывают на завершение процесса удлинения связей Fe(III)-лиганд для третьей ступени спинового перехода. Можно предположить, что понижение симметрии пространственной группы вызвано сильным искажением координационного узла Fe(III) при адаптации геометрии молекулы к ВС конфигурации.

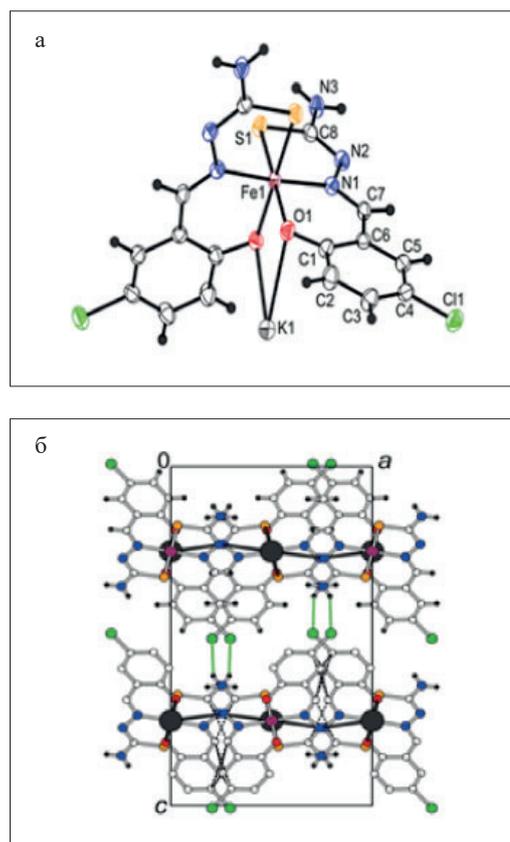


Рис. 1. а) Асимметричная единица в 1\* при 100К (тепловые колебания атомов с 50% вероятностью, ORTEP). б) Проекция кристаллической структуры 1\* на ось b.

Эти результаты обеспечивают новую платформу для понимания многоступенчатого поведения спин-переменных комплексов Fe(III) на основе лигандов thsa-типа и могут стать шагом на пути к рациональному созданию новых родственных соединений с заданными характеристиками спинового перехода.

Работа выполнена в рамках Государственного задания, рег. номер №АААА-А19-119092390079-8, АААА-А19-119032690060-9.

[1] Spitsyna N.G., Blagov M.A., Lazarenko V.A., Svetogorov R.D., Zubavichus Y.V., et. al., *Inorganic Chemistry*. (2021), V. 60, №23, P. 17462–17479.

# ЦЕНТРЫ ОКРАСКИ Ag, Au, Rb, Nd, Er В ЦИНК-ФОСФАТНЫХ СТЕКЛАХ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЗАКАЛКИ ИЗ РАСПЛАВА: АТОМНАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

**В.В. Срабионян<sup>1</sup>, М.П. Ветчинников<sup>2</sup>, Е.М. Зинина<sup>2</sup>, Д.С. Рубаник<sup>1</sup>,  
В.А. Дурыманов<sup>1</sup>, И.А. Викленко<sup>1</sup>, Ю.Ю. Дмитриев<sup>1</sup>, Е.В. Храмов<sup>3</sup>,  
А.А. Велигжанин<sup>3</sup>, Л.А. Авакян<sup>1</sup>, Г.Ю. Шахгильдян<sup>2</sup>,  
В.Н. Сигаев<sup>2</sup>, Л.А. Бугаев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ЮФУ

<sup>2</sup>РХТУ имени Д.И. Менделеева

<sup>3</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Одним из перспективных подходов к усилению люминесценции редкоземельных (РЗ) ионов в лазерных средах является сенсбилизация ионов за счет их взаимодействия с плазмонными наночастицами (НЧ). Установленные механизмы таких взаимодействий показали зависимость усиления люминесценции от множества факторов, требующих тщательного подбора исходных компонентов, их концентраций, методов и условий синтеза материалов (НЧ-РЗ-ионы)/стекло, а также понимания структурных состояний выбранных компонентов и их трансформации в ходе синтеза. В настоящей работе изучены атомная структура (методом XAS), области локализации (методом ПЭМ) и оптические свойства (методами оптической спектроскопии) центров окраски Ag, Au, Rb, Nd, Er, сформированных в цинк-фосфатном стекле ( $ZnO-P_2O_5$  с окном прозрачности вплоть до NIR) методом закалки из расплава с целью их последующего использования в качестве исходных элементов для создания в стекле структур (НЧ-РЗ-ионы) методом прямой лазерной записи с использованием жестко сфокусированного пучка фемтосекундного лазера. Использование ионов Ag и Au обусловлено наличием у соответствующих наночастиц выраженных поверхностных плазмонных резонансов (LSPR). Ионы Rb представляют интерес и как самостоятельные сенсбилизаторы РЗ-ионов, и с точки зрения способности образовывать частицы Rb с сильным LSPR в NIR области. Определена атомная структура окружения ионов  $Nd^{3+}$ ,  $Er^{3+}$  и их пространственное распределение по объему стекол, полученных рассмотренным выше методом.

Работа выполнена при поддержке РФФ (согл. №23-12-00102).

# ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИЙ (n, f), (n, $\gamma$ ), ( $\gamma$ , f) И ( $\gamma$ , xn, p) В ОБРАЗЦАХ X $^{209}\text{Bi}$ , $^{238}\text{U}$ , $^{237}\text{Np}$ НА УСКОРИТЕЛЯХ ОИЯИ НУКЛОТРОН, ФАЗОТРОН И ЛИНАК-200

С.И. Тютюнников, В.И. Стегайлов, В.А. Рахимова

...Исследования глубоко неупругих ядерных процессов их теоритическое описание являются основной задачей коллаборации «Энергия + Трансмутация» [1]. Эксперименты проводились на ускорителях ОИЯИ: Нуклотрон, Фазотрон и LINAC-200.

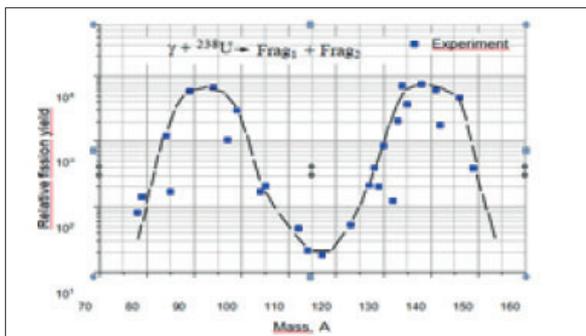
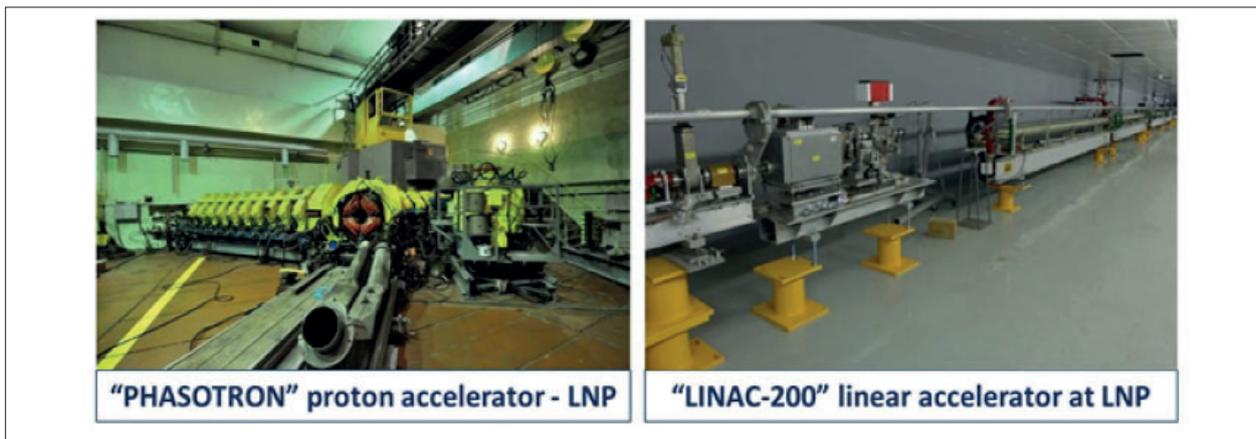


Рис. 2. Образец  $^{238}\text{U}$  в поле тормозного излучения,  $E_e = 140 \text{ MeV}$

В ходе проведенных экспериментов исследовались реакции (n, f), (n,  $\gamma$ ) и ( $\gamma$ , xn, p). В экспериментах использовались мишени  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$  и  $^{209}\text{Bi}$ . Представлены количественные результаты продуктов реакций деления (n, f) на пучках протонов в образцах  $^{238}\text{U}$ , а также количественные результаты продуктов фотоядерных реакции ( $\gamma$ , xn) на пучках электронов в образцах  $^{238}\text{U}$  и  $^{209}\text{Bi}$ .

На (рис. 2) представлена кривая деления ядер урана в поле тормозного излучения пучка электронов с  $E_e = 140 \text{ MeV}$ .

[1] S.I. Tyutyunnikov, V.I. Stegailov et al., // «NUCLEUS-2021». St-Petersburg, 130 (2021).

# СИНТЕЗ ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ПЛАТИНЫ, ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО ТЕРМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУЧЕННОГО НАНЕСЕННОГО КАТАЛИЗАТОРА Pt/Zn/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

О.В. Сулимова<sup>1,2</sup>, Н.С. Смирнова<sup>1</sup>, И.А. Якушев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева

Биметаллические карбоксилатные комплексы на основе металлов платиновой группы являются удобными предшественниками для синтеза нанесенных гетерогенных катализаторов восстановления кислорода [1], а также парциального гидрирования ненасыщенных углеводородов [2]. Введение неблагородного металла в состав комплекса приводит к изменению его свойств, в первую очередь каталитических, и позволяет изменять их в достаточно широких пределах. Тем не менее получение таких комплексов сопряжено с синтетическими трудностями. В настоящей работе предложен альтернативный подход к синтезу этого класса соединений и проведено исследование термических и каталитических свойств одного из таких комплексов,  $\text{ZnPt}(\text{OOCMe})_4(\text{H}_2\text{O})(\text{MeCOOH})_2$  (рис. 1) в восстановительных средах, и в реакции селективного гидрирования дифенилацетилена (рис. 2).

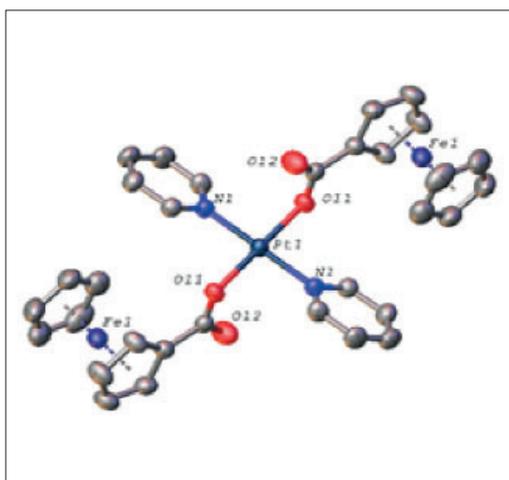


Рис. 1. Молекулярная структура  $\text{ZnPt}(\text{OOCMe})_4(\text{H}_2\text{O})(\text{MeCOOH})_2$

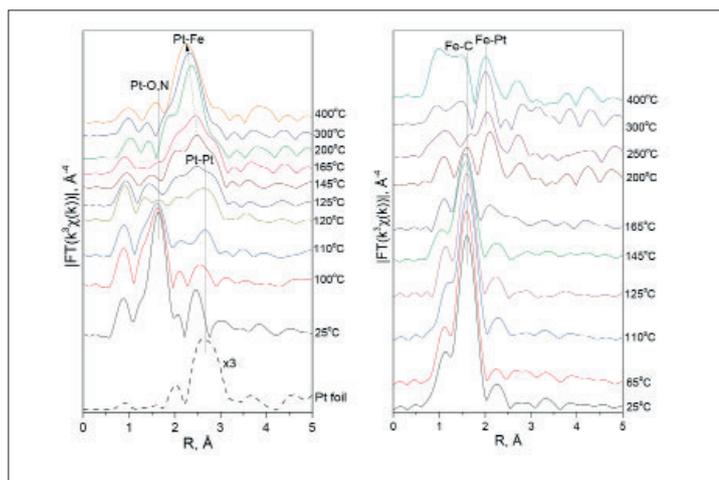


Рис. 2. Данные XAS *in situ* PtL<sub>3</sub>-края и Fe-края транс-[PtPt<sub>2</sub>(FeCOO)<sub>2</sub>] комплекса при восстановлении от 25 до 400°C в потоке H<sub>2</sub>/He

Методом *in situ* EXAFS/XANES и *ex situ* РФА с использованием синхротронного излучения установлено, что восстановление металлов начинается в мягких условиях, при 125°C, и завершается в диапазоне температур 300–400°C с образованием фазы интерметаллида. В зависимости от температуры термообработки получены материалы, показывающие различную активность и селективность в реакции селективного гидрирования.

[1] V.A. Grinberg, N.A. Mayorova, et al., *Electrochim. Acta* 299 (2019), 886–893.

[2] I.P. Stolarov, I.A. Yakushev, et al., *Mendeleev Commun.* 28(2018), 200–201.

# ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ ЦЕОЛИТОВ ТИПА MOR

**Г.Б. Сухарина<sup>1</sup>, А.М. Ермакова<sup>1</sup>, Я.Н. Гладченко-Джевелекис<sup>1</sup>, К.Д. Кулаев<sup>1</sup>,  
Е.Е. Поносова<sup>1</sup>, Э.И. Шеметова<sup>1</sup>, Л.А. Авакян<sup>1</sup>, В.В. Прядченко<sup>1</sup>, Л.А. Бугаев<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Южный федеральный университет*

Изучение структуры активных центров медьсодержащих цеолитов — это актуальная на сегодняшний день задача, поскольку цеолиты являются перспективными материалами для создания эффективных катализаторов процесса превращения метана в метанол. Основную сложность определения атомного строения ближнего окружения меди в данных исследованиях составляет неравномерное распределение медных центров в каркасе цеолита.

Создание катализаторов с оптимальными характеристиками для получения метанола сопряжено с установлением взаимосвязи условий синтеза, структуры и свойств, поскольку процесс синтеза оказывает влияние на параметры структуры и как следствие на каталитические свойства [1–3].

Исследование локальной атомной структуры медных центров цеолитов типа морденит (MOR), полученных твердофазным и жидкофазным методами синтеза, было выполнено на разных этапах каталитического цикла. На основе анализа Cu K-XAFS спектров Cu-MOR, полученных с использованием синхротронного излучения и многомасштабного компьютерного моделирования определены наиболее вероятные модели локальной атомной структуры образовавшихся активных центров меди в цеолите Cu-MOR.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект №23-22-00438.

[1] E.M.C. Alayon, M. Nachttegaal, et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 12 (2015).

[2] V.V. Srabionyan, G.B. Sukharina, et al., J. Phys. Chem. C. 125, 46 (2021).

[3] S.E. Bozbag, E.M.C. Alayon, et al., Catal. Sci. Technol. 6, 13 (2016).

# ВОЗМОЖНОСТИ СОВРЕМЕННЫХ ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВЫХ МЕТОДОВ В РЕШЕНИИ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

**М.В. Таланов<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Лаборатория терагерцовой спектроскопии, Центр фотоники и двумерных материалов,  
Московский физико-технический институт*

В докладе обсуждаются возможности применения теоретико-групповых методов современной теории фазовых переходов Ландау для расчета структуры веществ. Рассматривается роль симметрии параметра порядка в задачах классификации атомных [1] и магнитных структур [2], установления симметричной иерархии и путей формирования низкосимметричных фаз кристаллов [1, 3], исследования мультипорядка и скрытого порядка [4, 5], описания и интерпретации фазовых переходов [1–6], дизайна новых материалов [1, 7]. Показано, что теоретико-групповые методы являются мощным (во многих случаях – незаменимым) инструментом кристаллографического анализа и прогноза атомной, магнитной, орбитальной структур материалов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №22-72-10022.

- [1] M.V. Talanov, V.M. Talanov, Chem. Mater. 33, 2706 (2021).
- [2] M.V. Talanov, V.B. Shirokov, V.M. Talanov, Acta Mater. 259, 119187 (2023).
- [3] M.V. Talanov, Acta Cryst. A 75, 379 (2019).
- [4] M.V. Talanov, V.B. Shirokov et al., Acta Cryst. B 74, 337 (2018).
- [5] M.V. Talanov, Cryst. Growth Des. 18, 3433 (2018).
- [6] M.V. Talanov, A.A. Bush et al., Acta Mater. 227, 117734 (2022).
- [7] M.V. Talanov, V.M. Talanov, CrystEngComm. 22, 1176 (2020).

# КОМПОЗИТЫ В СИСТЕМЕ «ЦЕОЛИТЫ ТИПОВ MFI И BEA–СОЛИ $Ln(NO_3)_3 \cdot xH_2O$ ( $Ln = La, Gd$ )». ПОЛУЧЕНИЕ. СОСТАВ. СТРОЕНИЕ. АНТИМИКРОБНЫЕ СВОЙСТВА.

**Д.А. Тарханова<sup>1</sup>, Г.М. Кузьмичева<sup>1</sup>, Р.П. Терехова<sup>2</sup>, Р.Д. Светогоров<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «МИРЭА-Российский технологический университет»

<sup>2</sup>ФГБУ «НМИЦ хирургии имени А.В. Вишневского» Минздрава России

<sup>3</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Композиты из двух компонентов позволяют или улучшить функциональные свойства каждого из компонентов в рамках композита, или продемонстрировать новые. Композиты на основе цеолитов с функциональными частицами  $Ln(NO_3)_3 \cdot xH_2O$  ( $Ln = La-Lu$ ) сочетают особые свойства цеолитов (большая удельная поверхность, пористость; биосовместимость; каталитическая активность, селективность; термическая стабильность) и солей (биосовместимость; антимикробная активность – АМА), что позволяет создавать на их основе объекты медицинского назначения. Цель работы – установление связи зоны задержки роста ( $D$ , мм) ряда бактерий со структурными и микроструктурными характеристиками композитов. Композиты «цеолит- $Ln(NO_3)_3 \cdot xH_2O$ » (обозначены как «цеолит- $Ln$ ») получены твердофазным смешением с перетираанием компонентов и последующим отжигом при  $t = 250^\circ C$ ,  $\tau = 1$  час. Компоненты: цеолиты типов MFI ( $(H_x)[Fe^{3+}_x Si^{4+}_{12-x} O_{24}] - FeZSM$  с  $Si/Fe = 25, 68$  и  $[Ti^{4+}_x Si^{4+}_{12-x} O_{24}] - TiZSM$  с  $Si/Ti = 30, 47$ ) и BEA ( $(H_x)[Al^{3+}_x Si^{4+}_{12-x} O_{24}] - Beta$  с  $Si/Al = 12, 150$ ), соли  $Ln(NO_3)_3 \cdot xH_2O$  ( $Ln = La, Gd$ ) с пр. гр. P $\bar{1}$  ( $Z = 2$ ) и параметрами ячейки  $a = 8.93 \text{ \AA}$ ,  $b = 10.71 \text{ \AA}$ ,  $c = 6.65 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 77.92^\circ$  и  $a = 6.74 \text{ \AA}$ ,  $b = 9.13 \text{ \AA}$ ,  $c = 11.64 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 88.84^\circ$ , соответственно.

Установлено (рентгенография), что полученные композиты неоднородные: меньшее содержание цеолитов присутствует в системе «цеолит-La» (~10%) и соли в системе «цеолит-Gd» (~12%) по сравнению с исходными соотношениями, что вызвано присутствием рентгеноаморфной составляющей в образцах. Образцы в системах «FeZSM-La» ( $Si/Fe = 68$ ), «TiZSM-La» ( $Si/Ti = 30$ ), «Beta-La» и «Beta-Gd» ( $Si/Al = 12$ ) содержат исходное соотношение цеолитов и солей (~45% и ~55%). Композиты «цеолит-La» обладают большими размерами частиц, нежели «цеолит-Gd» (СЭМ). АМА в темноте (метод «колодцев») наибольшая у композитов на основе TiZSM: «TiZSM-Gd» с  $Si/Ti=47$  ( $D = 37$  мм; *S. aureus*), «TiZSM-La» с  $Si/Ti=47$  ( $D = 35$  мм; *P. aeruginosa*), «TiZSM-La» с  $Si/Ti=30$  ( $D=33$  мм; *E. coli*). Полученные композиты могут быть предложены для создания раневых повязок, дезинфицирующих и профилактических средств.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов на выполнение проектов Министерства науки и высшего образования РФ №0706-2020-0026.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЪЕКТОВ КУЛЬТУРНОГО НАСЛЕДИЯ НА УСТАНОВКЕ НЕЙТРОННОЙ РАДИОГРАФИИ И ТОМОГРАФИИ ИЯФ АН РУЗ

**М.Ю. Ташметов<sup>1</sup>, Н.Б. Исмаатов<sup>1</sup>, Ж.Б. Хакимов<sup>1</sup>, С.М. Адизов<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Институт ядерной физики АН РУз*

Метод нейтронной радиографии и томографии незаменим при исследованиях объектов культурного наследия, так как позволяет изучать внутреннее строение, выявлять наличие внутренних дефектов и, во многих случаях, выяснять оригинальную картину-фигуру-орнамент, которые могут быть скрыты из-за наличия ржавчины, окаменелости.

С учетом растущей тенденции в междисциплинарных прикладных исследованиях в области науки и техники, археологии и палеонтологии, растениеводства, геологии, сельского хозяйства была создана установка нейтронной радиографии и томографии на базе реактора ВВР-СМ ИЯФ АН РУз. Проектирование, изготовление, монтаж, наладка и запуск установки были выполнены совместно с ЛНФ ОИЯИ. Характеристический параметр  $L/D$  для установки равен 600. Максимальные размеры пучка нейтронов составляют  $90 \times 90$  мм<sup>2</sup>.

С помощью метода нейтронной радиографии и томографии исследованы пространственное распределение коррозии и структурных элементов в объеме железного и бронзового ножей, датированных II веком до нашей эры. Сегментированный объем коррозии составил 338.7 мм<sup>3</sup> или 17.7% от общего объема ножа. В толще лезвия бронзового ножа было обнаружено несколько округлых полостей со средним размером 1.5 мм.

В монете Деметрия установлено равномерное, а в монете Гелиокла неравномерное распределение ослабления нейтронов, что связано с наличием 10% патины (CuO) от общего объема в подражании монетам Гелиокла.

В докладе также будут представлены результаты исследования бронзовой монеты правителя Греко-Бактрийского царства и других объектов культурного наследия.

# ПРИМЕНЕНИЕ СИНХРОТРОННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ СМЕШАННЫХ КАРБОНАТОВ Np(V)

А.С. Кузенкова<sup>1</sup>, Ю.А. Тетерин мл.<sup>1,2</sup>, Е.С. Куликова<sup>2</sup>, А.Л. Тригуб<sup>1,2</sup>,  
М.Д. Шаульская<sup>1</sup>, Д.М. Цымбаренко<sup>1</sup>, Т.В. Плахова<sup>1</sup>,  
А.Ю. Романчук<sup>1</sup>, С.Н. Калмыков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Нептуний является высокорadioактивным элементом, который входит в состав отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). На сегодняшний день одним из возможных способов захоронения ОЯТ является глубинное захоронение в различных геологических формациях. Для обеспечения безопасности пунктов захоронения необходимо понимание миграционного поведения радионуклидов на молекулярном уровне. Карбонат-анионы и катионы щелочных и щелочноземельных металлов являются неотъемлемыми компонентами природных сред. Таким образом, целью работы стало изучение структур твердых фаз смешанных карбонатов Np(V), образующихся в присутствии катионов Na<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup>.

Синтез смешанных карбонатов Np(V) проводили двумя путями: химическим осаждением из раствора Np(V) (10<sup>-3</sup>М) в присутствии катионов Na<sup>2+</sup> или Ca<sup>2+</sup>, и методом катионного обмена. Для расшифровки структур смешанных карбонатов использовались методы рентгеновской дифракции (РФА) и спектроскопии рентгеновского поглощения (XANES, EXAFS), реализованные с помощью синхротронного излучения. Твёрдые фазы также были охарактеризованы с помощью растровой электронной микроскопии и энергодисперсионного анализа (РЭМ/ЭДС).

По данным РЭМ смешанные карбонаты Np(V) имеют пластинчатую морфологию, организованную в микро-цветки. В результате химического осаждения из раствора Np(V) в избытке NaHCO<sub>3</sub> образовалась фаза с соотношением Na:Np = 1:1. По данным порошковой рентгеновской дифракции решена структура NaNpO<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> · 3H<sub>2</sub>O в пространственной группе P1, проведено уточнение методом Ритвельда. Предложенные структурные параметры хорошо описывают данные EXAFS. В результате экспериментов по химическому осаждению из раствора Np(V) в присутствии Ca<sup>2+</sup> и катионному обмену (NaNpO<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> · 3H<sub>2</sub>O в среде CaCl<sub>2</sub>) были получены две фазы, отличающиеся по структуре, но имеющие общую формулу Ca<sub>0,5</sub>NpO<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>. Полученные фазы проиндицированы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ №22-73-10056.

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР БЕЛКОВ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ПЕПТИДНЫХ ВАКЦИН

**В.И. Тимофеев**<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова  
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Разработка инновационных высокоэффективных вакцин является одной из наиболее актуальных задач современной медицины. В настоящее время существуют подходы, основанные на глубоком машинном обучении для определения эпитопов в белке-мишени для конструирования пептидных вакцин. Существует два принципиально разных подхода для конструирования вакцин с использованием иммуноинформатики. Один из подходов основан на поиске эпитопов в целевом белке и их объединение в новый химерный белок. Главным минусом данного подхода является тот факт, что химерный белок не получится экспрессировать. Второй подход основан на выделении богатых эпитопами доменов и попытке использовать их в качестве вакцины. Такой подход требует знания пространственной структуры целевого белка. Несмотря на то, что в настоящее время используются различные как экспериментальные, так и вычислительные методы определения структуры белков, рентгеноструктурный анализ является основным методом определения пространственных структур белков. В настоящее время более 80% белковых структур определены методом рентгеноструктурного анализа. В настоящей работе структура оболочечного белка вируса лихорадки денге была использована для конструирования прототипа пептидной субъединичной вакцины от данного заболевания. Для конструирования прототипа вакцины были использованы основанные на глубоком машинном обучении методы иммуноинформатики. С использованием вычислительных методов показано, что полученный прототип растворим не токсичен и не вызывает аллергической реакции. С использованием иммуносимуляции показано, что данный прототип вызывает иммунный ответ.

# СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ НАНО-БИО-ГИБРИДНЫХ СТРУКТУР И КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

**С.С. Титова<sup>1</sup>, У.А. Цурикова<sup>2</sup>, Л.А. Осминкина<sup>2</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>3</sup>, А.М. Лебедев<sup>3</sup>,  
А.А. Кудрявцев<sup>4</sup>, С.В. Канькин<sup>1</sup>, А.И. Чукавин<sup>5</sup>, А.Н. Бельтюков<sup>5</sup>,  
Ю.С. Какулия<sup>1</sup>, Е.В. Парина<sup>1</sup>, О.А. Чувенкова<sup>1</sup>, С.Ю. Турищев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Воронежский государственный университет*

<sup>2</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова*

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт»*

<sup>4</sup>*Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН*

<sup>5</sup>*Удмуртский Федеральный Исследовательский Центр Уральского отделения РАН*

Вклад поверхности в наноразмерных структурах оказывает существенное влияние на свойства материала, в том числе, приводит к выявлению новых свойств, что обуславливает появление новых или альтернативных традиционным методов применения. Появление новых свойств биосовместимости наночастиц пористого кремния подтверждает вышесказанное. Наличие таких свойств открывает широкие перспективы для использования кремния в биомедицине и тераностике заболеваний.

Результатом совмещения неорганических наночастиц с биологическими, природоподобными объектами являются новые – нано-био-гибридные структуры. Данная работа нацелена на изучение состава, структуры и физико-химического состояния поверхности наночастиц пористого кремния в составе нано-био-гибридного материала после совмещения с клетками млекопитающих. А также на изучение влияния способа высушивания, как возможность изменения режимов взаимодействия и внедрения наночастиц в биологическую, в том числе, клеточную структуру.

В случае такого сложного исследования необходимо использование поверхностно-чувствительных методов, которые позволят изучать структуру и физико-химическое состояние поверхности внедряемых неорганических наночастиц, нано-био-гибридного объекта в целом. Поэтому основными для изучения описанных выше структур являются метод растровой электронной микроскопии и синхротронные методы рентгеноэлектронной спектроскопии XANES и XPS.

Полученные в ходе исследований результаты позволяют судить о необходимости подбора оптимальных условий получения наночастиц кремния для дальнейшего совмещения с клетками. Показана способность клеток млекопитающих изменять физико-химическое состояние поверхности core-shell наночастиц пористого кремния.

Исследование выполнено в рамках проекта РФФ №19-72-20180.

# АТОМНОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ДОПИРОВАННЫХ АЗОТОМ КЛАСТЕРОВ НАНО-ГРАФЕНА ПО ДАННЫМ КОМБИНИРОВАННОГО АНАЛИЗА МЕТОДАМИ XPS И XANES

**Д.Б. Толчина<sup>1</sup>, Л.А. Авакян<sup>1</sup>, В.В. Срабионян<sup>1</sup>, А.Т. Гюласарян<sup>2</sup>,  
А.Т. Козаков<sup>3</sup>, А.В. Никольский<sup>3</sup>, А.В. Емельянов<sup>4</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>4</sup>,  
Э.Г. Шароян<sup>2</sup>, А.С. Манукян<sup>2</sup>, Л.А. Бугаев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Южный федеральный университет*

<sup>2</sup>*Институт физических исследований Национальной Академии Наук Армении*

<sup>3</sup>*Научно-исследовательский институт Физики, Южный федеральный университет*

<sup>4</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

Определены изменения электронной и локальной атомной структуры азотсодержащих углеродных образцов, обладающих ферромагнитными свойствами при комнатной температуре, в зависимости от условий синтеза и используемых прекурсоров. Образцы получены методом твердофазного пиролиза фталонитрила и фталоцианина при различных давлениях. Методом просвечивающей электронной микроскопии изучено строение углеродных микросфер в образцах. Путем комбинированного анализа рентгеновских фотоэлектронных N 1s спектров (N 1s XPS) и околопороговой области K-спектров рентгеновского поглощения азота (N K-edge XANES), определены типы связей и параметры атомной структуры для ближнего окружения азота в синтезированных образцах. Определены длины и углы связей в азотсодержащих атомных конфигурациях, включая трехатомные цепочки C–N–C для пиридинового (Pyridinic N) и пиррольного (Pyrrolic N) азота, а также конфигурации O = N – 2C для четырех – координированного азота = Quaternary N (QN)  $\equiv$  Oxidized N. Установлено процентное содержание этих структурных состояний азота в образцах и его зависимость от условий синтеза.

Организация, финансировавшая выполнение данной работы: Российский фонд фундаментальных исследований РФФИ №20-52-05011 Арм\_a.

# ОТ ГЕЛЕЙ ДО ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ КОЛЛАГЕНА: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

**А.Н. Третьякова<sup>1,2</sup>, А.В. Наумкин<sup>1</sup>, Э.В. Штыкова<sup>3</sup>, А.Ю. Васильков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН

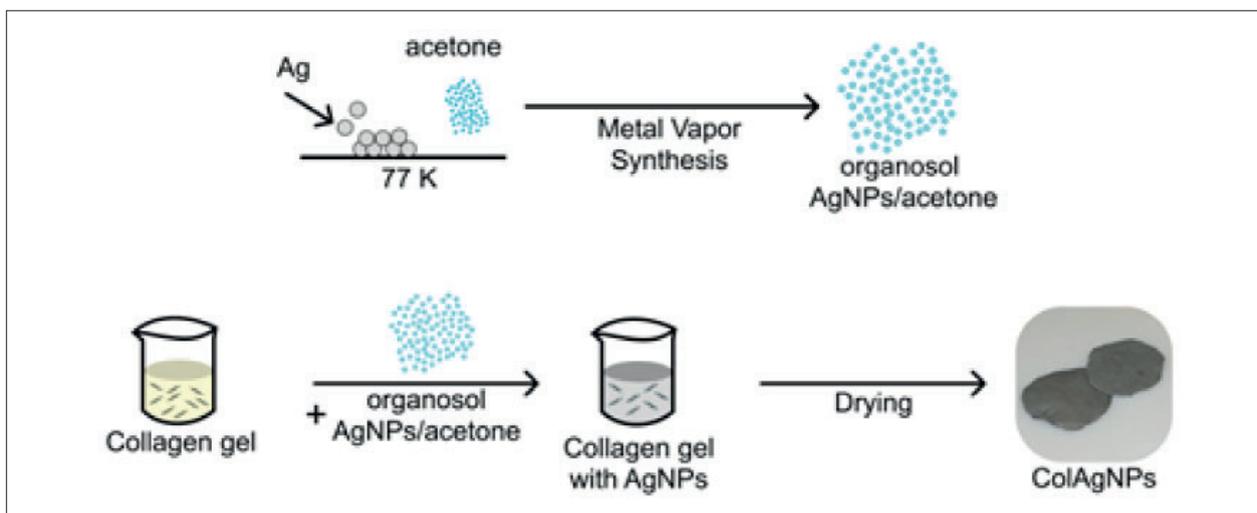
<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский институт)

<sup>3</sup>Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Новый гибридный материал получен на основе геля коллагена (Col), содержащего наночастицы Ag (AgNPs), синтезированные методом металло-парового синтеза (МПС) [1]. В качестве дисперсионной среды для получения наночастиц Ag в МПС был использован ацетон.

Образцы были исследованы комплексом физических методов: МУРР, РФА, РФЭС и СЭМ. Анализ гелей методом МУРР показал, что частицы Ag имеют широкое мономодальное распределение по размерам до 100 нм, пик которого соответствует 30 нм. Методом РФЭС определен состав поверхности наноматериалов. Установлено, что металл находится в состоянии Ag<sup>0</sup>. По данным РФА установлена рентгеноаморфная структура Col и определен размер AgNPs в материале около 23 нм. Морфология Col и ColAgNPs изучена методом СЭМ.

Полученный материал ColAgNPs обладает антибактериальными и противогрибковыми свойствами, что делает его перспективным для использования в качестве раневого покрытия.



[1] A.Yu. Vasil'kov, N.E. Tseomashko, A.N.Tretyakova, et al., Coatings 13, 8 (2023).

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СБОЕУСТОЙЧИВОСТИ ЦИФРОВЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ НА ПЛУТОНИЙ-БЕРИЛЛИЕВОМ ИСТОЧНИКЕ

П.А. Александров<sup>1</sup>, Е.В. Ефименко<sup>1</sup>, П.Ю. Макавеев<sup>1</sup>,  
Е.И. Уксусов<sup>1</sup>, С.С. Фанченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский Институт»

Сбоеустойчивость современной микроэлектронной аппаратуры при облучении ставит предел её использования в системах управления аппаратов космического назначения. В исследовании рассматривается результат облучения цифровых микросхем на Pu-Be источнике, при этом весь эффект складывается из двух компонент – воздействия гамма-квантов и быстрых нейтронов. В качестве источника нейтронов использовался Pu-Be источник со средней энергией несколько большей, чем в энергетическом спектре нейтронов деления. В случае гамма-облучения с возрастанием интегральной дозы происходит увеличение токов утечки и сдвиг вольт-амперных характеристик МОП-транзисторов в сторону отрицательных напряжений. В случае быстрых нейтронов происходят единичные сбои из-за накопления зарядов на ячейках памяти в результате ионизации, вызванной первично выбитыми атомами.

Для определения воздействия гамма-излучения использовались отечественные микросхемы 573РФ2, выпускавшиеся в СССР с 1988 года – это микросхемы с памятью типа EPROM (Erasable Programmable Read-Only Memory). Микросхема 573РФ2 облучалась нейтронным пучком в течение недели с флюенсом  $2.67 \cdot 10^{11}$  н/см<sup>2</sup>, при этом она непрерывно опрашивалась микропроцессором, который был вне пучка нейтронов. В результате наблюдается 663 сбоя в ячейках памяти микросхемы с общей памятью в 16 кбит, при этом критическая доза для наблюдения сбоев оказалась около 100 крад в соответствии с литературными данными.

Для определения воздействия быстрых нейтронов использовались запрограммированные под ячейки памяти SRAM и процессор NIOS-II микросхемы ПЛИС Altera Cyclone 4 EP4CE10F17C8 и Altera MAX 10 10M08SAE144C8GES, использованы аналогичные режимы облучения, обнаружены единичные сбои, происходящие с характерной частотой один сбой за несколько минут.

# ОСОБЕННОСТИ АТОМНОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ SnO<sub>2</sub> ПО ДАННЫМ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

К.А. Фатеев<sup>1</sup>, О.А. Чувенкова<sup>1</sup>, С.В. Рябцев<sup>1</sup>, С.Ю. Турищев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Воронежский государственный университет

Популярным газочувствительным материалом является тонкопленочные структуры на основе оксида олова SnO<sub>2</sub>. При переходе к наноматериалам могут быть достигнуты преимущества в таких показателях, как низкая стоимость, высокая чувствительность, малое энергопотребление, способность к интеграции с другими устройствами и способность к миниатюризации. Примером могут быть нитевидные кристаллические структуры на основе оксида олова с высоким соотношением поверхности к объему. Свойства таких объектов находятся в прямой зависимости от атомного и электронного строения развитой поверхности. Знания о специфике локального атомного окружения поверхности нитевидных нанокристаллов, ее физико-химическом состоянии должно позволить управляемо формировать такие объекты с заданными свойствами.

В работе исследованы нитевидные кристаллы оксида олова, полученные методом газотранспортного синтеза. Кроме того, были исследованы 30 нм тонкие пленки оксида олова, полученные методом магнетронного распыления и отожженные на воздухе и пленки, полученные методом химического осаждения из газовой фазы. Исследования проводились синхротронными методами спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS).

Показано, что существенный количественный вклад поверхности по сравнению с объемом нитевидных кристаллов оксида олова сечением до 20 нм, при протяженности до нескольких микрометров, приводит к влиянию несовершенства поверхности на электронно-энергетический спектр, состав, физико-химическое состояние этой поверхности. В случае существования условий, обеспечивающих формирование упорядоченной (кристаллической) структуры диоксида олова, специфика морфологии не оказывает значительного влияния на распределение основных особенностей электронного спектра, в том числе для нитевидных кристаллов. Доокисление пленок металлического олова до SnO<sub>2</sub> приводит к формированию двухфазной системы, состоящей из орторомбического и тетрагонального диоксида олова. Вариации условий формирования нитевидных кристаллов оксида олова могут позволить управлять их атомным и электронным строением, физико-химическим состоянием для современных электронных устройств.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ №21-53-12042 ННИО\_а.

# КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ДИСПЕРСНЫХ ФАЗ ТИТАНОВОГО ПСЕВДО $\beta$ -СПЛАВА НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСНОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДИФРАКЦИИ И РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ, ЭЛЕКТРОНОВ И РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

С.Н. Петров<sup>1</sup>, Н.Ф. Дроздова<sup>1</sup>, М.Л. Федосеев<sup>1</sup>,  
М.С. Михайлов<sup>1</sup>, Е.В. Забавичева<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов «Прометей»  
имени И.В. Горынина Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Проблема аттестации состояния дисперсных фаз вызывает значительный интерес у широкого круга исследователей. Для решения этой проблемы весьма перспективным является совместное использование методов различной локальности, интегральных – рассеяния и дифракции нейтронов и рентгеновских лучей в комплексе с высокоразрешающими методами ПЭМ и РЭМ, которые и были применены в настоящем исследовании для аттестации дисперсных фаз в псевдо- $\beta$ -титановом сплаве после различных режимов упрочняющей термообработки [1].

Прочность  $\alpha+\beta$ -титановых сплавов определяется дисперсными выделениями вторичной  $\alpha$ -фазы, в связи с чем проведен количественный фазовый анализ образцов псевдо- $\beta$ -титанового сплава VT22 с использованием малоуглового рассеяния нейтронов, рентгеновской дифракции, дифракции обратнорассеянных электронов и ПЭМ (рис. 1), в сочетании с рентгеноспектральным микроанализом [2]. На основе комплексного использования данных с различных уровней локальности, получена информация о размерах, форме, элементном составе и объемном содержании дисперсных частиц. По полученным значениям содержания фаз определена энергия активации процесса распада  $\beta$ -фазы, позволившая оценить кинетические закономерности, для оптимизации температурно-временных параметров стадии старения.

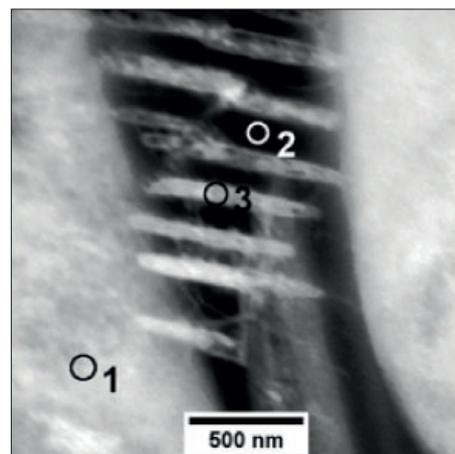


Рис. 1. Тонкая структура образца 2А и участки локального элементного анализа, отмеченные кружками. 1 – первичная  $\alpha$ -фаза, 2 –  $\beta$ -фаза, 3 – вторичная  $\alpha$ -фаза

[1] А.С. Кудрявцев, Е.В. Чудаков, В.П. Кулик, Н.В. Третьякова, Материаловедение, 10, 2 (2017).

[2] С.Н. Петров, Н.Ф. Дроздова, М.Л. Федосеев, М.С. Михайлов, Е.В. Святышева, А.Х. Исламов, Металловедение и термическая обработка металлов, 93, 1 (2020).

# УЛЬТРАЗВУКОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ПРОПИЛЕНГЛИКОЛЯ ПРИ ДАВЛЕНИЯХ ДО 1.4 ГПа

**Ю.Д. Фомин<sup>1</sup>, И.В. Данилов<sup>1</sup>, Е.Л. Громницкая<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина РАН*

Пропиленгликоль является важной жидкостью, применяемой в ряде технологических процессов, в первую очередь, как антифриз. Поэтому изучение его свойств имеет важное значение как для фундаментальной науки, так и для прикладных применений. В тоже время свойства пропиленгликоля при высоком давлении практически не изучены.

В настоящей работе проводится измерение упругих модулей и плотности пропиленгликоля ультразвуковыми методами до рекордно высокого давления в 1 ГПа при комнатной температуре и температуре жидкого азота. Результаты измерений дополняются компьютерное моделирование методом молекулярной динамики с двумя различными моделями: COMPASS [1] и Charm [2].

Было показано, что уравнение состояния из ультразвуковых измерений при комнатной температуре хорошо совпадает с полученным из моделирования с моделью COMPASS. Основываясь на этом, данная модель была выбрана для изучения микроскопических свойств пропиленгликоля. Были произведены расчёты радиальных функций распределения центров масс молекул и парциальные радиальные функции распределения атомов кислорода и водорода. На основе последних было оценено число водородных связей в системе. Было получено, что оно составляет примерно 0.6 связей на молекулу и практически не зависит от давления.

Работа опубликована в статье [3].

Экспериментальная часть работы поддержана грантом РФФИ №22-22-00530. Компьютерное моделирование было проведено при поддержке гранта РФФИ №19-12-00111.

[1] H. Sun// COMPASS: An ab-initio force-field optimized for condensed-phase application – overview with details on alkane and benzene compounds// J. Phys. Chem. B 1998., V. 102, 38. P. 7338–7364.

[2] K. Vanommeslaeghe, E. Hatcher, C. Acharya, S. Kundu, S. Zhong, J. Shim, E. Darian, O. Guvench, P. Lopes, I. Vorobyov, Jr.A.D. Mackerell// CHARMM General Force Field (CGenFF): A force \_eld for drug-like molecules compatible with the CHARMM all-atom additive biological force fields// J. Comput. Chem. 2010. V. 31. P. 671–690.

[3] Yu.D. Fomin, I.V. Danilov, E.L. Gromnitskaya// Ultrasonic study and molecular dynamics simulation of propylene glycol at pressures up to 1.4 GPa// Physica Scripta. 2023. DOI 10.1088/1402-4896/acc1b5.

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СТАНЦИЯ «СТРУКТУРНОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ» – СТМ

**Е.В. Храмов<sup>1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>1</sup>, А.Л. Тригуб<sup>1</sup>, Н.А. Колышкин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский Институт»

Станция «Структурное Материаловедение» – лидер по количеству публикаций среди экспериментальных станций источника синхротронного излучения КИСИ-Курчатов. Сочетание простой конструкции, востребованного экспериментального метода и методик *in situ* позволило создать вокруг станции большое сообщество пользователей в России и за рубежом [1].

Основной экспериментальный метод, реализованный на станции – рентгеноабсорбционная спектроскопия (XAS). XAS – элементарно-чувствительный метод, позволяющий получить параметры локальной структуры металлоцентров в рентгеноаморфных фазах, например, стеклах, растворах или наночастицах, а также в материалах с низкой концентрацией исследуемого элемента, таких как белки, катализаторы и допированные кристаллы. Измерение XAS возможно для химических элементов тяжелее Ti в режиме пропускания с помощью ионизационных камер или по выходу флуоресценции с помощью SDD-детектора КЕТЕК.

Также на станции установлена газовакуумная ячейка для экспериментов *in situ*, которая позволяет осуществлять измерения XAS по пропусканию в газовой среде ( $\text{He}+5\%\text{H}_2/\text{CO}/\text{CH}_4$ ) или вакууме при температурах 10–800 К [3]. В качестве дополнительной характеристики образцов в ходе экспериментов *in situ* можно использовать рентгенофазовый анализ на двумерном детекторе Pilatus [4].

Перспективы развития станции – расширение возможностей *in situ/operando* за счет применения пользовательских экспериментальных ячеек: микрофлюидных, электрокаталитических, высокого давления, а также повышение качества рутинно измеряемых спектров *ex situ* при помощи низкотемпературных измерений в ячейке, охлаждаемой жидким азотом.

[1] Y. Kotolevich, E. Kolobova et al. Catal. Today. 278 (2016).

[2] N.N. Trofimova, A.A. Veligzhanin, et al. Ross. Nanotechnol., 8 (2013).

[3] V.V. Volkov, V.I. Sidey et al. J. Alloys Compd., 899 (2022).

# ВЛИЯНИЕ РАЗНЫХ МЕТОДОВ СУШКИ НА ОРГАНИЗАЦИЮ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ НАТИВНОЙ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

**Н.В. Цвигун<sup>1</sup>, Л.А. Иванова<sup>2</sup>, Р.Ю. Смыслов<sup>2,3</sup>, Х.Э. Ёров<sup>4</sup>, Ю.Е. Горшкова<sup>5</sup>,  
А.Е. Баранчиков<sup>4</sup>, А.К. Хрипунов<sup>3</sup>, А.А. Кульминская<sup>2</sup>, Г.П. Копица<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

*<sup>2</sup>Петербургский институт ядерной физики  
имени Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт»*

*<sup>3</sup>Институт высокомолекулярных соединений РАН*

*<sup>4</sup>Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН*

*<sup>5</sup>Лаборатория Нейтронной Физики имени И.М. Франка,  
Объединенный Институт Ядерных Исследований*

В последнее время значительно возрос интерес к органо-неорганическим композитам, что связано с применением подобных материалов в различных областях, включая оптоэлектронику, медицину и т.д. Композиты на основе бактериальной целлюлозы (БЦ) обладают естественной способностью к биодegradации и биосовместимостью, что делает их привлекательными в медицине, пищевой промышленности и косметологии. В тоже время, для практического применения, в основном, используется не нативная, а подвергнутая предварительной обработке (механическая дезинтеграция, химический или ферментативный гидролиз, сушка в разных условия) БЦ.

В данной работе выполнено исследование влияния разных методов сушки на надмолекулярную структуру нативной БЦ. Высушенные образцы БЦ были получены: сушкой на воздухе, лиофильной сушкой, сушкой методом замены растворителей (изопропиловый спирт – МТВЕ – гептан) при атмосферном давлении, а также методом сверхкритической сушки в  $\text{CO}_2$ . Нативный и высушенные образцы БЦ были исследованы методами: РФА, МУРН, УМУРН, МУРР, СЭМ, АСМ, вискозиметрии и низкотемпературной адсорбции азота.

Установлено, что все высушенные образцы БЦ представляют собой пористые системы со сложной иерархической организацией надмолекулярной структуры, состоящие из случайно ориентированных нанолент, обладающих развитой фрактальной поверхностью, из которых, путем взаимного проникновения (переплетения, запутывания), формируется трехмерная (3D) полимерная сеть. При этом выявлено, что метод сушки нативной БЦ оказывает существенное влияние как на структурные параметры нанолент (характерные размеры, фрактальная размерность поверхности), так и на организацию структуры 3D полимерной сети в целом.

Обнаружено, что сушка на воздухе приводит к наиболее значительным изменениям надмолекулярной структуры нативной БЦ, а самым щадящим методом сушки является метод СК в  $\text{CO}_2$ .

# СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫЕ МАТРИЦЫ ДЛЯ МИКРОСКОПИИ СТРУКТУРНЫХ ПРОЦЕССОВ

**Н.В. Классен<sup>1</sup>, И.С. Цебрук<sup>1</sup>, С.А. Винокуров<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна  
Российской академии наук*

С развитием синхротронной техники и усилением рентгеновских потоков активно развивается рентгеновская микроскопия. Для получения рентгеновских изображений применяется несколько вариантов фокусировки. Взятые от оптики схемы на линзах и зеркалах сложны технически из-за очень слабого преломления и жестких требований к точности обработки. В рентгеновской микроскопии чаще используются более простые капиллярные системы фокусировки, которая производится плавными изгибаниями фокусирующего пучка микрокапилляров. Прошедшие через образец или переизлученные им рентгеновские кванты собираются пучком выходных микрокапилляров, оси которых исходят от точки фокуса и плавно переправляют эти кванты на многопиксельную матрицу детекторов, преобразующую их энергии в электрические сигналы. Обычно это – полупроводниковые детекторы, работающие при охлаждении.

В нашей работе такие приемные устройства заменяются на пирамидальные матрицы сцинтилляционных микроволокон, входные торцы которых направлены на точку фокуса, а оси ориентированы по исходящим от нее радиусам, так что рентгеновские кванты, вылетевшие из фокуса в определенном направлении, захватываются одним из микроволокон и идут вдоль его оси к выходному торцу. Боковые грани микроволокна образуют пирамиду, расширяющуюся к выходу так, чтобы вошедшие кванты до генерации сцинтилляционных вспышек света не касались стенок. На выходе сцинтилляционной матрицы установлена матрица фотодетекторов, формирующих электросигналы. Нами разработаны несколько технологий формования микроволокон требуемых геометрий: экструдирование композиций органика – неорганика, прессование пластичных сцинтилляционных кристаллов типа иодида цезия или бромида лантана, электрокристаллизация из растворов и др.

Среди преимуществ такой приемной системы – уменьшенные габариты и отсутствие охлаждения. Это позволяет за счет легкости перемещений по конфокальной схеме быстро регистрировать объемные микрораспределения проходящих, излучаемых и рассеянных рентгеновских потоков внутри образцов путем продольно – поперечного сканирования. Варьирование составов и морфологий сцинтилляторов дает возможность оптимально подбирать параметры выходной сцинтилляционной матрицы применительно к конкретным задачам рентгеновской микроскопии: рентгенофазовому и рентгеноспектральному анализам структурных превращений и химического состава, диагностике миграции легирующих атомов и т.д.

# ВЛИЯНИЕ СОСТАВА НАНОГРАНУЛ НА СТРУКТУРНЫЕ И МЕМРИСТИВНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ

**К.Ю. Черноглазов<sup>1</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>1</sup>, Е.В. Храмов<sup>1</sup>, А.В. Ситников<sup>1,2</sup>,  
В.А. Демин<sup>1</sup>, В.В. Рыльков<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Воронежский Государственный Технический Университет

<sup>3</sup>Фрязинский филиал Института радиотехники  
и электроники имени В.А. Котельникова РАН

В настоящее время наблюдается значительный интерес к изучению мемристивных структур типа металл-диэлектрик-металл, демонстрирующих обратимые эффекты резистивного переключения (РП), в связи с перспективами их использования для создания элементов многоуровневой памяти и массивов мемристоров в матричном исполнении, имитирующих синапсы при построении нейроморфных вычислительных систем, нацеленных на решение задач искусственно интеллекта [1, 2].

В данной работе выполнены сравнительные исследования мемристивных свойств металл/нанокомпозит/металл (М/НК/М) образцов на базе нанокомпозитов (НК)  $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_{3-y})_{100-x}$  и  $(\text{CoFe})_x(\text{LiNbO}_{3-y})_{100-x}$ , полученных из разных составных мишеней  $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}\text{-LiNbO}_3$  и  $\text{Co}_{50}\text{Fe}_{50}\text{-LiNbO}_3$ , соответственно. Кроме того, с использованием синхротронных методов изучены структурные особенности НК пленок, которые были синтезированы на подложках из полиимида в тех же условиях, что и М/НК/М образцы [3]. Показано, что кристаллическая структура гранул в обоих типах НК оказывается одинаковой, что свидетельствует о том, что значительная часть атомов В при синтезе НК оказывается в изолирующей матрице, образуя оксид типа  $\text{V}_2\text{O}_3$ . Оба типа структур М/НК/М демонстрируют РП, однако, в случае НК с бором эффект РП проявляется значительно сильнее, что объясняется существенной ролью в РП вакансий кислорода, образованных при окислении бора.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения №075-15-2023-324.

[1] Z. Wang, H. Wu, G.W. Burr, C.S. Hwang, K.L. Wang, Q. Xia, J.J. Yang, Nat. Rev. Mater. 5, 173 (2020).

[2] M. Lanza1, A. Sebastian, W.D. Lu, M.L. Gallo, M.-F. Chang, D. Akinwande, F.M. Puglisi, H.N. Alshareef, M. Liu, J.B. Roldan, Science 376, 1066 (2022).

[3] К.Ю. Черноглазов, Р.Г. Чумаков, Е.В. Храмов, К.Э. Никируй, А.В. Ситников, В.А. Демин, Э.М. Пашаев, В.В. Рыльков, ФТТ 65, 1602 (2023).

# ИНТЕРКАЛЯЦИЯ АНИОННЫХ МАЛОНАТОВ МЕДИ И ХРОМА В СЛОИСТЫЙ ГИДРОКСИД ИТТРИЯ

Е.Д. Шейченко<sup>1,2</sup>, А.Д. Япрынци, Н.В. Гоголева<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научно-исследовательский университет «Высшая школа экономики»

<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова

Слоистые гидроксиды РЗЭ (СГ РЗЭ) – новый класс слоистых неорганических анионообменных материалов, значительный интерес к которым связан с возможностью сочетания уникальных свойств лантанидов (люминесцентных, магнитных, каталитических) и интеркалированных анионов для создания многофункциональных материалов на основе данных соединений. Перспективными анионами для интеркаляции в СГ РЗЭ являются координационные соединения металлов, однако, на данный момент не существует универсальной методики интеркаляции комплексов широкого ряда металлов в СГ РЗЭ. Универсальным лигандом является малонат-анион поскольку он образует устойчивые комплексы с ЩЗМ, РЗЭ и переходными металлами, а варьирование заместителя малонатов позволяет контролировать структуру получаемых комплексов. Особый интерес представляет возможность проводить реакции с интеркалированными комплексами используя межслоевое пространство СГ РЗЭ как нанореактор, что позволит получать новые гибридные соединения РЗЭ и переходных металлов для каталитических приложений.

Целью данной работы стала разработка методики интеркаляции в слоистый гидроксид иттрия различных малонатов переходных металлов и их последующий отжиг.

Впервые показана возможность интеркаляции комплексов переходных металлов (на примере малонатов меди и хрома) в слоистый гидроксид иттрия. Малонаты переходных металлов интеркалируются в слоистый гидроксид иттрия уже при комнатной температуре. Согласно данным РФА, размер межслоевого расстояния слоистого гидроксида иттрия коррелирует со стехиометрией и размером заместителя малоната интеркалируемого комплекса. В результате отжига полученных соединений, при температурах до 500°C происходила аморфизация продукта, а при 800°C образовывалась фаза состава  $Y_2Cu_2O_5$ . Отжиг аморфного продукта в атмосфере водорода приводит к образованию металлической меди.

# ВЛИЯНИЕ ОКТА И ТЕТРА ЗАПОЛНЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ В $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$ И $\text{Cr}_x\text{ZrSe}_2$

**А.С. Шкварин<sup>1</sup>, А.И. Меренцов<sup>1</sup>, М.С. Постников<sup>1</sup>, Е.Г. Шкварина<sup>1</sup>, А.Н. Титов<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Институт физики металлов имени М.Н. Михеева  
Уральского отделения Российской академии наук*

Дихалькогениды переходных металлов представляют собой широкий класс материалов, обладающих различными физическими [2] и практически интересными свойствами [1]. Слоистая структура таких материалов позволяет внедрять в межслоевое пространство атомы и даже молекулы, что значительно расширяет возможности модификации свойств. Системы на основе  $\text{TiSe}_2$  позволяют внедрять атомы переходных металлов в межслоевом пространстве только в октаэдрически окруженные атомами халькогена позиции. Системы же на основе  $\text{ZrSe}_2$  позволяют интеркалированным атомам как окта, так и тетра позиции.

В данной работе изучена электронная и кристаллическая структура, а также свойства для  $\text{Cr}_x\text{ZrSe}_2$  и  $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$ , в которых наблюдается распределение интеркалированных атомов по окта и тетра позициям.

Электронная структура изучена экспериментально методами XPS, XAS и ResPES на синхротроне Elettra, линия superESCA ( $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$ ) и на Курчатовском специализированном источнике синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» ( $\text{Cr}_x\text{ZrSe}_2$ ). Кристаллическая структура изучена полно-профильным уточнением методом Ритвельда. Установлено, что при малых концентрациях ( $x \leq 0.3$ ) Атомы интеркалированного металла занимают как окта так и тетра позиции, при увеличении концентрации происходит полный переход атомов интеркаланта в тетра позиции. Экспериментальные данные по проводимости и магнитным свойствам хорошо коррелируют с кристаллической структурой. Обнаружены изменения в электронной, соответствующие переходу интеркаланта из окта в тетра позиции.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №22-13-00361).

[1] A.S. Shkvarin et al. Electronic structure of octahedrally coordinated Cr in  $\text{Cr}_x\text{TiX}_2$  ( $X = \text{Se}, \text{Te}$ ) and  $\text{Ti}_x\text{Cr}_{1-x}\text{Se}_2$  // J. Electron Spectros. Relat. Phenomena. 2016. Vol. 206. P. 12–17.

[2] E. Morosan et al. Superconductivity in  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$  // Nat. Phys. 2006. Vol. 2, №8. P. 544–550.

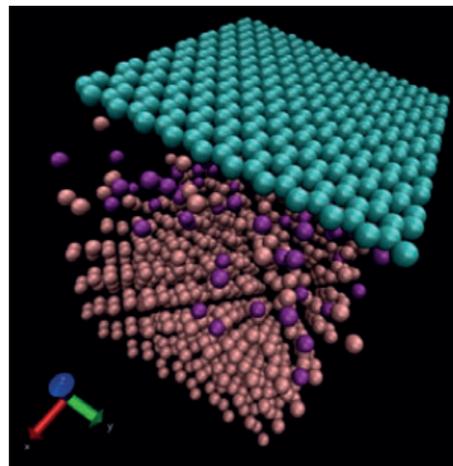
# МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ НАНОСИСТЕМ В СОВРЕМЕННОЙ МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

**Е.А. Шрамков<sup>1</sup>, Р.Г. Чумаков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Молекулярной динамикой (МД) называется метод компьютерного моделирования, где эволюция во времени ансамбля взаимодействующих атомов определяется интегрированием уравнений их движения [1]. С помощью данного подхода можно, в том числе, описывать взаимодействие кластеров частиц между собой, что позволяет рассчитывать свойства наносистем, применяемых в современной микроэлектронике.

В рамках приведённой работы для моделирования поведения систем использовался свободный пакет для классической молекулярной динамики применимый для многоатомных расчётов – LAMMPS. Объектами расчётов стали диффузия атомарного кислорода через монослой графена и взаимодействие молекулы фторфуллерена с внешним электрическим полем. Первый объект является математическим описанием эксперимента, проведённого группой учёных из НИЦ «Курчатовский институт» [2]. В рамках данного эксперимента на монокристалл кремния с образованным аморфным слоем оксида кремния с помощью химического осаждения наносился монослой графена. В случае нагрева полученной структуры до температуры в 890°C и удержании в течение 50 минут, при последующем анализе методом дифракции на быстрых электронах в снимаемом спектре не наблюдалось характерных для кислорода пиков. Изображение расчетной системы диффузии кислорода через графен в начальный момент времени приведено на рисунке 1.



[1] А.А. Селезнёв. Основы метода молекулярной динамики / А.А. Селезнёв. – Саров : СарФТИ, 2017. – 72 с.

[2] S.S. Ivan, V.A. Dmitry, E.P. Oleg, et al., Proximity Coupling of Graphene to a Submonolayer 2D Magnet // small. – 2023.

# АНАЛИЗ АГРЕГАЦИОННОГО СОСТОЯНИЯ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ АНИЗОТРОПНОГО МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

**А.В. Шуленина<sup>1,2</sup>, М.В. Авдеев<sup>3,1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>2</sup>, Г.С. Петерс<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова*

<sup>2</sup>*НИЦ «Курчатовский институт»*

<sup>3</sup>*Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка,  
Объединенный институт ядерных исследований*

В данной работе представлены результаты анализа данных малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) на магнитных жидкостях (МЖ) во внешнем магнитном поле, где наблюдается упорядочение цепочек магнитных частиц. Для описания агрегатов в полидисперсных МЖ ранее было предложено использовать анизотропные картины рассеяния МУРР при помещении МЖ в магнитное поле [1]. Поведение магнитных частиц в магнитном поле интересно с практической точки зрения, благодаря возможному влиянию на макроскопические свойства МЖ. Внешнее магнитное поле позволяет частично снять усреднение по ориентациям в таких объектах и повысить информативность малоугловых данных, а именно получить дополнительную оценку размерных параметров частиц и агрегатов, присутствующих в растворе. Когда МЖ помещают в умеренные магнитные поля (до 1 Тл), агрегаты ориентируются вдоль поля, не нарушая равновесия. Исследованы водные биосовместимые МЖ, где частицы  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  покрыты неионогенным поверхностно-активным веществом – Полисорбат-80. Чтобы избежать сложных эффектов взаимодействия в исследуемых системах, были взяты низкие концентрации магнитных частиц в МЖ (~ 0,2 об.%). Определены размерные параметры агрегатов магнитных частиц в жидкости. На основе анализа анизотропии двумерных МУРР во внешнем магнитном поле было выявлено структурное упорядочение как для агрегатов наночастиц, так и для цепочек самих агрегатов. Такие цепочки ответственны за появление анизотропии при рассеянии, когда они ориентированы в магнитном поле. Этим объясняется эффект быстрого насыщения анизотропии при малом параметре диполь-дипольного взаимодействия. Полученные результаты сравниваются с результатами анализа данных МУРР для МЖ, где магнитные наночастицы стабилизированы двойным слоем олеата натрия.

[1] A.A. Veligzhanin, D.I. Frey, A.V. Shulenina, A. Yu. Gruzinov, Ya.V. Zubavichus, M.V. Avdeev, JMMM 459 (2018) 285–289.

# УЛЬТРАМАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ НА РЕАКТОРЕ ИР-8: СТАТУС И ПЕРСПЕКТИВЫ

Е.В. Яковенко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

В докладе будет представлена ультрамалоугловая мода трёхосного спектрометра на идеальных кристаллах СТОИК на реакторе ИР-8, предназначенная для исследований микроструктуры конденсированного вещества в диапазоне размеров  $0,1 \div 10$  мкм. Будет дано описание конструкции прибора, оптической схемы, рабочих характеристик и проекта модернизации, направленной на повышение чувствительности моды УльтраМУРН. Также будут представлены примеры последних исследований в области материаловедения и медицинской биофизики.

# ВЛИЯНИЕ МЕЖФАЗНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В СИСТЕМЕ NiOx-ГРАФЕНОВАЯ ПЛОСКОСТЬ НА ФОРМИРОВАНИЕ ПРОВОДЯЩЕЙ СТРУКТУРЫ В ГИБРИДНЫХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ ДЛЯ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

**Г.Э. Яловега<sup>1</sup>, И.В. Ершов<sup>2</sup>, М. Brzhezinskaya<sup>3</sup>, В.А. Шматко<sup>1</sup>, В.О. Дмитриев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Южный Федеральный Университет*

<sup>2</sup>*Донской государственный технический университет*

<sup>3</sup>*Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie*

Одну из решающих ролей в определении эффективности суперконденсаторов играют характеристики границы раздела композиционного материала, в том числе тип химических связей между компонентами. Это объясняется тем, что объединение NiO с графеном или углеродными нанотрубками не только увеличивают площадь поверхности NiO, но и обеспечивает проводящие пути, способствующие быстрому электрохимическому кинетическому процессу зарядки-разрядки при высокой плотности тока. Композиты с нековалентным типом взаимодействия могут демонстрировать более высокие электрофизические характеристики по сравнению с композитами аналогичного состава, но с ковалентным типом взаимодействия на границах раздела фаз. Межфазное взаимодействие в системе NiOx-графеновая плоскость было изучено с помощью взаимодополняющих экспериментальных и теоретических методов на основе теории функционала плотности (DFT), рентгеновской дифракции (XRD), спектроскопии комбинационного рассеяния, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) и рентгеновской абсорбционной спектроскопии (NEXAFS и XANES) с использованием синхротронного излучения. Определен тип межфазного взаимодействия и его корреляция с электрохимическими характеристиками. Показано, что в системе NiOx-графен реализуется смешанный тип межфазного взаимодействия, при котором перенос заряда происходит через связи Ni-C и Ni-O-C. Наличие не только связей Ni-O-C, но и связей Ni-C может увеличить контакт между NiO и графеновой плоскостью, способствуя переносу электронов и улучшая тем самым электрохимические характеристики.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда №23-22-00459.

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА Mo- И W-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ЦЕОЛИТА СО СТРУКТУРОЙ MFI

**Б.Ю. Янжимаев<sup>1</sup>, А.А. Велигжанин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт»

Цеолит MFI активно используется в нефтегазохимии как монофункциональный кислотный катализатор бифункциональный катализатор с активными центрами на основе переходных металлов. Цеолиты с молибденом и вольфрамом имеют потенциал в процессах дегидроароматизации метана и метатезиса олефинов.

В докладе исследуются закономерности каталитического действия металлсодержащих цеолитов SPP, а также исследуются особенности молибденсодержащих активных центров в цеолитах MFI.

Каталитические свойства образцов в реакции дегидроароматизации метана исследовались в кварцевом реакторе с неподвижным слоем катализатора при температуре 700°C, в качестве газа-разбавителя подавался азот. Реакцию метатезиса пропилена проводили в реакторе проточного типа, находящегося в трехзонной печи, позволяющей задавать необходимое температурное поле.

Физико-химические свойства катализаторов исследовали методами рентгенфлуоресцентного анализа, СЭМ, РФА, низкотемпературной адсорбции азота, ТПД NH<sub>3</sub>, спектроскопией комбинационного рассеяния и спектроскопией поглощения рентгеновских лучей.

Показано, что в реакции дегидроароматизации метана предпочтительно использование SPP с низким содержанием как молибдена, так и Бренстедовских кислотных центров. В случае метатезиса пропилена, напротив, требуется высокое содержание алюминия.

Данные EXAFS-спектроскопии, совместно с результатами КР-спектроскопии, дифракции рентгеновского излучения и каталитических экспериментов позволяют подтвердить встраивание молибдена в решётку цеолита для образца, полученного в результате гидротермальной обработки.