Конгресс пользователей ЦКП СКИФ:
перспективные исследования с использованием синхротронного излучения

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

17–21 ноября 2025, Новосибирск

Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов"
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
"Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук"

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук»

Министерство образования и науки Российской Федерации

Международная конференция

Конгресс пользователей ЦКП СКИФ: перспективные исследования с использованием синхротронного излучения

17—21 ноября 2025 г., Новосибирск, Россия

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

https://indico.inp.nsk.su/event/136/

Новосибирск – 2025

УДК 52-624: 577 + 004.89 + 544.47 + 542.2
ББК 22.382.528с: 28.070 + 32.813.5 + 24.544
К64

К64 **Конгресс пользователей ЦКП СКИФ: перспективные исследования с использованием синхротронного излучения. Международная конференция:**
Сборник тезисов (17 - 21 ноября 2025 г., Новосибирск, Россия)
[Электронный ресурс] / под редакцией акад. В.И. Бухтиярова, акад. РАН Е.Б. Левичева, д.ф.-м.н. Я.В. Зубавичуса, д.х.н. А.В. Бухтиярова, к.ф.-м.н. И.А. Рубцова, к.ф.-м.н. А.А. Сараева
– Новосибирск : Институт катализа СО РАН, 2025.
– адрес размещения https://catalysis.ru/resources/institute/Publishing/Report/2025/skif-2025.pdf
– ISBN 978-5-906376-66-4

В надзаг.:

- Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук"
- Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук
- Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»
- Министерство образования и науки Российской Федерации

Сборник включает тезисы пленарных, устных и стендовых докладов по направлениям:
– Оборудование для станций СИ ЦКП СКИФ
– Теоретические и прикладные аспекты экспериментальных методов, использующих синхротронное излучение ЦКП СКИФ
– Новые алгоритмы обработки данных, искусственный интеллект и машинное обучение при массовом анализе данных ЦКП СКИФ
– Структура катализаторов и функциональных материалов на основе синхротронной диагностики
– Синхротронное излучение для структурной биологии

УДК 52-624: 577 + 004.89 + 544.47 + 542.2
ББК 22.382.528с: 28.070 + 32.813.5 + 24.544

ISBN 978-5-906376-66-4

© Институт катализа СО РАН, 2025

ОРГАНИЗАТОРЫ

- Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук"
- Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук
- Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»
- Министерство образования и науки Российской Федерации

СКИФ
СИБИРСКИЙ КОЛЬЦЕВОЙ ИСТОЧНИК ФОТОНОВ

ИК
ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА им. Г.К. БОРЕСКОВА

Институт ядерной физики имени Г. И. Будкера СО РАН

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Конференция проводится при поддержке
Минобрнауки Российской Федерации
грант №075-15-2025-460

Партнеры конференции

ООО "Адватекс", Москва

ООО "Техноинфо", Москва

ООО "Токио Боэки Евразия", Москва

ООО "МИЛЛАБ", Москва

ООО "Группа Ай-Эм-Си", Москва

ООО "Научные приборы и системы", Новосибирск

ООО Научно-технологический центр "ЭМТИОН", Москва, Зеленоград

ООО "Диа-М", Москва

Сопредседатели конгресса

Академик РАН Валерий Иванович БУХТИЯРОВ, Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Академик РАН Левичев Евгений Борисович, ЦКП «СКИФ», Кольцово

Научный комитет

Председатель: Зубавичус Ян Витаутасович, д.ф.-м.н., ЦКП «СКИФ», Кольцово

Заместитель председателя: Бухтияров Андрей Валерьевич, д.х.н., ЦКП «СКИФ», Кольцово

Секретарь: Рубцов Иван Андреевич, к.ф.-м.н., ЦКП «СКИФ», Кольцово

Члены научного комитета:

Благов Александр Евгеньевич, чл.-корр. РАН, НИЦ "Курчатовский институт", Москва

Борщевский Валентин Иванович, д.ф.-м.н., Московский физико-технический институт, Долгопрудный

Гоголев Алексей Сергеевич, к.ф.-м.н., Томский политехнический университет, Томск

Денисов Владимир Викторович, к.т.н., Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

Завьялов Пётр Сергеевич, к.т.н., Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН, Новосибирск

Калмыков Степан Николаевич, академик РАН, Московский государственный университет, Москва

Киреев Всеволод Вадимович, к.х.н., Департамент стратегического развития Минобрнауки Российской Федерации, Москва

Кулипанов Геннадий Николаевич, академик РАН, Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск

Марченко Михаил Александрович, д.ф.-м.н., Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Прууэл Эдуард Рейнович, д.ф.-м.н., Институт гидродинамики СО РАН, Новосибирск

Салихов Сергей Владимирович, к.ф.-м.н., Университет науки и технологий МИСИС, Москва

Снигирев Анатолий Александрович, к.ф.-м.н., Балтийский федеральный университет, Калининград

Солдатов Александр Владимирович, д.ф.-м.н., Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Турищев Сергей Юрьевич, д.ф.-м.н., Воронежский государственный университет, Воронеж

Углов Владимир Васильевич, д.ф.-м.н., Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

Федорук Михаил Петрович, академик РАН, Новосибирский государственный университет, Новосибирск

Хрусталев Виктор Николаевич, д.х.н., Российский университет дружбы народов, Москва

Шехтман Лев Исаевич, д.ф.-м.н., Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск

Организационный комитет

Гольденберг Борис Григорьевич, к.т.н., ЦКП «СКИФ», Кольцово
Золотарев Константин Владимирович, к.ф.-м.н., ЦКП «СКИФ», Кольцово
Золотарев Михаил Константинович, ЦКП «СКИФ», Кольцово
Коновалова Анна Юрьевна, ЦКП «СКИФ», Кольцово
Конторович Елена Владимировна, ЦКП «СКИФ», Кольцово
Кузин Максим Витальевич, к.т.н., ИЯФ СО РАН, Новосибирск
Логунова Светлана Сергеевна, ИК СО РАН, Новосибирск
Малыгина Александра Борисовна, ЦКП «СКИФ», Кольцово
Николенко Антон Дмитриевич, к.ф.-м.н., ЦКП «СКИФ», Кольцово
Саввиных Мария Александровна, ЦКП «СКИФ», Кольцово
Сараев Андрей Александрович, к.ф.-м.н., ЦКП «СКИФ», Кольцово
Суворова Марина Сергеевна, ИК СО РАН, Новосибирск
Шефер Кристина Ивановна, к.х.н., ЦКП «СКИФ», Кольцово

ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ

ПЛ-1 – ПЛ-9

ПЛ-1

Синхротронные и нейтронные исследования в России: текущий статус и перспективы

Ковальчук М.В., Благов А.Е., Марченков Н.В.
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
marchenkov_nv@nrcki.ru

Термин «мегасайенс» определяет наиболее крупные научные комплексы и проекты, которые представляют собой уникальную исследовательскую инфраструктуру, созданную на основе одной или нескольких крупномасштабных экспериментальных установок. Такие установки, комплексы и проекты выделены в особый класс не только по своим размерам, технической сложности и стоимости, но также по уровню научных исследований и значимости результатов. Исследовательская инфраструктура класса «мегасайенс» – важнейший элемент технологического суверенитета, показатель высокого научного уровня и устойчивого инновационного развития страны. Основная задача создания таких установок – открывать новые горизонты научных знаний и технологий, которые определяют наше будущее. Возможность реализации таких проектов – признак высокого потенциала научно-технологического развития государства, наличия собственной повестки в сфере наук и высоких технологий, и, как следствие, – основа технологической независимости, неотъемлемая часть формирования принципиально нового облика техносферы.

Источники синхротронного излучения (СИ) и исследовательские нейтронные реакторы, ускорительные источники нейтронов – особый класс мегаустановок, имеющих важнейшее значение для инновационного развития современного мира. Это сверхмощные, мультидисциплинарные научные комплексы, позволяющие на атомарном уровне изучать структуру и строение материалов. Такие установки охватывают широчайший спектр решаемых научных задач от физики, химии, материаловедения и микроэлектроники до биологии, медицины и промышленного и индустриального применения полученных результатов. Так, например, сегодня практически ни одно лекарство в мире, действие которого направлено на изменение активности того или иного белка в организме человека, бактериальных клетках или вирусах, не разрабатывается без определения молекулярной структуры белка-мишени с высоким разрешением, что возможно сделать только с использованием синхротронного излучения и нейтронов. Практически все изделия наноиндустрии, микроэлектроники зарабатываются на основе структурных данных, получаемых с помощью синхротронного излучения. Синхротронное излучение представляет собой ключевой метрологический инструмент нанотехнологий, являющихся основой формирования и развития принципиально новой техносферы. И что особенно важно, знание атомной структуры биологических систем и объектов, а также понимание заложенных природой фундаментальных принципов функционирования живых систем - это путь к воспроизводству природных механизмов в искусственных системах, созданных человеком, – путь создания природоподобных технологий.

ПЛ-1

Советскими и российскими учеными был сделан целый ряд фундаментальных открытий и прорывных разработок мирового уровня, которые, по сути, представляют собой основы работы современных ускорительных комплексов для физики высоких энергий и источников синхротронного излучения. Исаак Яковлевич Померанчук и Дмитрий Дмитриевич Иваненко открыли синхротронное излучение, Владимир Иосифович Векслер предложил основной принцип работы синхротрона – принцип автофазировки, Виталий Лазаревич Гинзбург предложил принципы действия излучающих устройств современных синхротронных центров – ондуляторов. Евгением Леонидовичем Салдиным был предложен основной принцип работы лазера на сводных электронах – самоусиление спонтанной эмиссии. Важным этапом в истории развития отечественной инфраструктуры синхротронных исследований стал запуск в 1999 г. Курчатовского источника синхротронного излучения, который и по сей день остается единственным специализированным источником синхротронного излучения не только в России, но и на постсоветском пространстве.

Все вышесказанное создало предпосылки для развертывания в России национальной программы развития исследований на источниках установках класса «мегасайенс». Указом Президента Российской Федерации от 25 июля 2019 года №356 «О мерах по развитию синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры в Российской Федерации» и Федеральной научно-технической программой развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на период до 2030 года и дальнейшую перспективу предусмотрено создание на территории Российской Федерации национальной сети исследовательской инфраструктуры класса «мегасайенс». Головной научной организацией Программы определен НИЦ «Курчатовский институт».

Программой предусмотрено создание уникального источника синхротронного излучения четвертого поколения с лазером на свободных электронах СИЛА в г. Протвино, международного центра нейтронных исследований на базе высокопоточного реактора ПИК в г. Гатчина, источника синхротронного излучения поколения 4+ СКИФ в р.п. Кольцово, а также синхротрона РИФ в Дальневосточном регионе на о. Русский. В рамках Программы будет существенно модернизирован источник синхротронного излучения КИСИ-Курчатов в г. Москва. В качестве пилотного проекта на базе протонного ускорителя У-70 будет создан безреакторный источник нейтронов для структурных исследований ОМЕГА в г. Протвино.

Цель создания национальной сети исследовательской инфраструктуры класса «мегасайенс» – комплексное решение задач ускоренного развития синхротронных и нейтронных исследований, необходимых для создания прорывных технологий, а также обеспечение создания и развития передовой исследовательской инфраструктуры в Российской Федерации.

ПЛ-2

ЦКП «СКИФ»: Текущий статус проекта

Бухтияров В.И.
Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
vib@catalysis.ru

ЦКП “СКИФ” – источник СИ поколения 4+, создаваемый в наукограде Кольцово под Новосибирском. Ускорительный комплекс ЦКП “СКИФ” состоит из линейного ускорителя электронов с энергией 200 МэВ, синхротрона-бустера на полную энергию 3 ГэВ и накопительного кольца. Накопитель релятивистских электронов с энергией 3 ГэВ, периметром 476 м и сверхмалым расчетным горизонтальным эмиттансом 73.2 пкм·рад будет поставлять пучки СИ с предельной яркостью в диапазоне от 10 эВ до 100 кэВ на 30 экспериментальных станций. Для энергии фотонов ~1.5 кэВ эмиттанс источника приближается к волновому (дифракционному) пределу, обеспечивая высокую степень когерентности СИ, что расширяет потенциал исследовательского комплекса. Инфраструктура ЦКП “СКИФ” будет использована для выполнения исследований мирового уровня в различных областях физики, химии, материаловедения, молекулярной биологии, медицины и других дисциплин с акцентом на наиболее прорывные, экономически и социально-значимые мультидисциплинарные задачи.

Экспериментальными станциями “СКИФ” первой очереди являются станции 1-1 “Микрофокус”, 1-2 “Структурная диагностика”, 1-3 “Быстропротекающие процессы”, 1-4 “XAFS-спектроскопия и магнитный дихроизм”, 1-5 “Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне” и 1-6 “Электронная структура”.

Основной задачей функционирования ЦКП “СКИФ” станет инфраструктурное обеспечение фундаментальных и прикладных исследований научных и образовательных организаций, а также организаций реального сектора экономики, выступающих в роли пользователей, с целью обеспечения лидерства в приоритетных областях научно-технологического развития Российской Федерации.

ПЛ-3

Опыт использования синхротронного излучения для решения фундаментальных и прикладных задач радиохимии

Романчук А.Ю.
Московский государственный университет, Москва, Россия
romanchuk.anna@gmail.com

ПЛ-4

Источник синхротронного излучения ЦКП СКИФ и его пользовательские характеристики

Пиминов П.А.
ЦКП «СКИФ», Наукоград Кольцово, Россия
p.a.piminov@srf-skif.ru

Источник синхротронного излучения поколения 4+ ЦКП СКИФ находится в завершающей стадии своего создания. В докладе представлен текущий статус ускорительного комплекса, план-график запуска установки и получения проектных параметров. Обсуждаются возможные режимы генерации СИ для пользователей экспериментальных станций первой очереди, потенциал для реализации станцией второй очереди, перспективы для создания других экспериментальных методик.

ПЛ-5

Устройства генерации излучения ЦКП «СКИФ»

Шкаруба В.А.
Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия
shkaruba@mail.ru

Основными устройствами генерации синхротронного излучения на источнике ЦКП СКИФ будут сверхпроводящие вставные устройства. В ИЯФ СО РАН в настоящее время создаётся пять сверхпроводящих многополюсных вставных устройств, оптимизированных для проведения экспериментов на нескольких исследовательских станциях первой очереди накопителя. Сверхпроводящий вигглер для станции 1-5 («Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне») имеет поле 4.5 Тл и период магнитной структуры 48 мм. Для стации 1-3 («Быстропротекающие процессы») предназначен вигглер с полем 2.7 Тл с периодом 27 мм, параметры которого являются рекордными с точки зрения достижения максимального уровня поля при минимальном периоде для вертикальной апертуры вакуумной камеры для пучка, равной 5 мм, и приближаются к физическому и техническому пределу. Два сверхпроводящих 258-полюсных ондулятора с уровнем поля 1.25 Тл и периодом 15.6 мм предназначены для генерации излучения на станциях "Микрофокус" (1-1) и "Структурная диагностика" (1-2). 220-полюсный ондулятор с полем 1.6 Тл и периодом 18 мм будет использоваться на станции “XAFS-спектроскопия и магнитный дихроизм”. Криогенная система сверхпроводящих вигглеров и ондуляторов основана на косвенном охлаждении с помощью криокулеров и позволяет, охлаждая «сухие» магниты до температуры менее 3.5 К, работать в тоннеле накопителя автономно в течение нескольких лет без расхода гелия. В докладе представлен статус работ по созданию данных сверхпроводящих устройств, в том числе, обоснование выбора основных параметров, особенности конструкции магнитной и криогенной системы, а также результаты испытаний на различных этапах их изготовления.

ПЛ-6

Синхротрон «КИСИ-Курчатов» - текущий статус, перспективы развития, пользовательская политика

Светогоров Р.Д.
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
rdsvetov@gmail.com

Курчатовский источник синхротронного излучения (КИСИ-Курчатов) – единственный на постсоветском пространстве источник синхротронного излучения является самой востребованной установкой класса «мегасайенс» в России. На сегодняшний день научно-исследовательская инфраструктура "КИСИ-Курчатов" насчитывает 12 экспериментальных исследовательских станций разной направленности от фундаментальных исследований в области физики, химии, биологии и изучения объектов археологии и культурного наследия до прикладных разработок в области материаловедения и медицины.

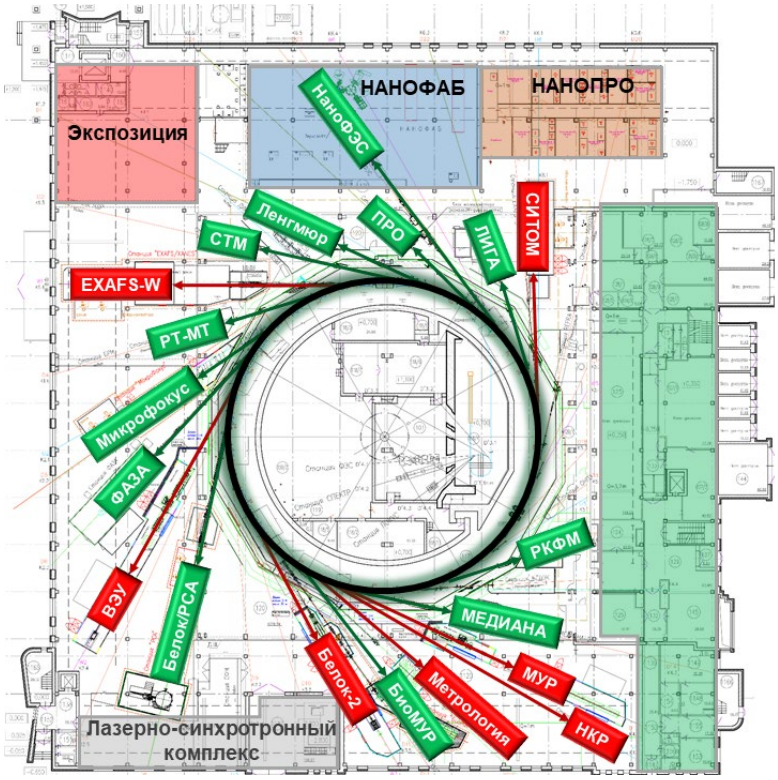


Рис. 1. Исследовательская инфраструктура КИСИ-Курчатов

Ежегодно на синхротроне «КИСИ-Курчатов» выполняется более 120 экспериментов по заявкам от ~50 организаций-пользователей, включая научные институты, образовательные организации высшего образования, а также организации из реального сектора экономики. По результатам проведенных исследований ежегодно публикуется более 120 научных статей в ведущих научных изданиях. Кроме того, «КИСИ-Курчатов» пользуется высоким спросом в качестве объекта инфраструктуры в рамках конкурсов Российского научного фонда «Проведение исследований на базе существующей научной инфраструктуры мирового уровня», третий раз подряд становясь самой востребованной установкой как по числу

поданных заявок, так и по числу поддержанных проектов, что подтверждает его высокую значимость для отечественной науки.

Важной задачей является развитие функциональных возможностей исследовательских мегаустановок, включая введение в эксплуатацию новых современных экспериментальных станций, а также строительство новых источников, позволяющих решать комплекс важнейших задач переднего края науки и новых технологий. В частности, на 2026-2028 годы запланирована глубокая модернизация синхротрона "КИСИ-Курчатов", направленная на достижение уровня источника синхротронного излучения 3-го поколения. Свойства синхротронного пучка (яркость, стабильность, диапазон энергий) будут значительно улучшены, что откроет возможность для реализации широкого спектра экспериментальных задач по визуализации внутренней структуры твердого тела: от классического материаловедения, кристаллографии и структурной химии до задач микроэлектроники, молекулярной биологии и биомедицины.

ПЛ-7

Рентгеновская дифрактометрия макромолекулярных монокристаллов

Борщевский В.И., Попов А.Н.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Москва, Россия

popov.an@mipt.ru

Макромолекулярная рентгеновская кристаллография (МК) является доминирующим методом определения трёхмерных структур биологических макромолекул. За последние 30 лет использование синхротронного излучения, пиксельных двумерных детекторов, высокоточных гониометров, новых скоростных компьютерных методов контроля и обработки измерений кардинально улучшили и упростили процесс сбора дифракционных данных, что привело к экспоненциальному росту числа исследованных структур. Наряду с традиционным методами измерения дифракции, развиваются новые альтернативны подходы, такие как серийная кристаллография, "розово-лучевая" кристаллография и кристаллография при энергиях выше 25 кэВ и ниже 5 кэВ.

В данном обзоре мы представим краткую историю развития, опишем современное состояние методов и аппаратуры и обсудим перспективы использования МК на синхротронном излучении для более глубокого понимания биологических процессов и разработки новых лекарственных препаратов.

Благодарности: Исследование выполнено при поддержке РНФ № 24-14-00295.

ПЛ-8

Детекторы рентгеновского излучения: статус и перспективы для станций ЦКП «СКИФ»

Шехтман Л.И.
1 – Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск Россия
3 – Томский государственный университет, Томск, Россия
4 – Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
L.I.Shekhtman@inp.nsk.su

В докладе будут описаны основные типы детекторов, которые применяются в настоящее время в экспериментах на пучках синхротронного излучения, такие как, люминофоры с памятью (image plates), детекторы на основе ПЗС- и КМОП-матриц, плоско-панельные детекторы, а также гибридные пиксельные детекторы. Особое внимание будет уделено также разработкам уникальных детекторов для изучения быстропротекающих процессов, которые запускаются в настоящее время для станции 1-3 «Быстропротекающие процессы» ЦКП СКИФ. Группа ИЯФ СО РАН также разрабатывает полупроводниковые детекторы прямого счета рентгеновских фотонов с энергетическим разрешением, которые будут применяться для дифракционных исследований на станциях ЦКП СКИФ.

ПЛ-9

Искусственный интеллект и машинное обучение на синхротронах: от обработки данных на лету к планированию эксперимента

Солдатов М.А.[1], Проценко Б.[1], Кулаев К.[1], Гуда С.А.[2], Гуда А.А.[1], Солдатов А.В.[1]

1 – Международный институт интеллектуальных материалов Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

2 – Институт математики, механики и компьютерных наук Южного Федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

mikhailsoldatov@sfedu.ru

Современные источники синхротронного излучения (поколение 4+) могут генерировать терабайты данных в минуту [1,2]. Традиционные методы анализа, основанные на ручной обработке данных, уже не справляются с такими потоками информации, что делает искусственный интеллект (ИИ) и машинное обучение (МО) важнейшими технологиями для эффективного использования экспериментального времени и ресурсов. К основным направлениям применения ИИ и МО на синхротронах можно отнести: обработку данных на лету, планирование эксперимента [3], автоматизация принятия решений [4,5], интеграцию с цифровыми двойниками эксперимента, семантические базы данных и RAG-подходы (Retrieval-Augmented Generation).

Более двадцати лет назад в Южном федеральном университете был разработан подход для определения структурных параметров с использованием теоретического анализа спектров рентгеновского поглощения (СРП) в ближней к краю области (международный термин – XANES) и их многомерной интерполяции, как функции структурных параметров [6,7]. Рост вычислительных мощностей, а также оптимизация использующихся алгоритмов для расчёта спектров СРП [8] позволили разработать инструменты для анализа спектров рентгеновского поглощения на основе искусственного интеллекта и машинного обучения pyfitit [9] и deepfit [10].

PyFitit - это инструмент, который является развитием предложенного в FitIt подхода, основанный на алгоритмах машинного обучения. Для удобства пользователей и расширения возможностей модификации алгоритмов, была выбрана реализация кода в Jupyter Notebook. Анализ спектров выполняется в два этапа. Сначала серия экспериментальных СРП анализируется статистически с использованием метода главных компонент. Далее, главные компоненты аппроксимируются теоретическими интерполированными спектрами. Были реализованы различные схемы выбора узлов для алгоритмов аппроксимации и обучения, включая градиентный бустинг случайных деревьев, радиальные базисные функции и нейронные сети. Процедура аппроксимации может быть выполнена как для СРП в ближней к краю области, так и для разностного спектра, что минимизирует систематические ошибки теоретического моделирования.

DeepFit – инструмент для уточнения структуры «одноатомных» катализаторов и координационных соединений по СРП, основанный на методах глубокого обучения с учетом физических и химических характеристик. Для обучения нейросети была построена обширная базу данных, содержащая порядка 67 000 возможных локальных атомных окружений и

соответствующих им спектров XAS на за K-краем поглощения, рассчитанных для всех 3d- и 4d-переходных металлов. Была использована современная универсальная модель глубокого обучения для быстрого спектрального прогнозирования, которая учитывает физические ограничения посредством эквивариантности, обеспечивая согласованность с фундаментальными симметриями. Объединяя квантовую химию и дифференциацию нейронных сетей DeepFit, был реализован подход к уточнению атомной структуры с учетом химических характеристик, позволяющий прогнозировать трехмерную структуру с учетом как спектроскопический, так и энергетических критериев. Таким образом, DeepFit представляет собой новый универсальный метод быстрого анализа СРП, в котором оптимизация структуры происходит с учетом как квантово-химических критериев, так и спектральных.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 25-42-00116.

Литература:

[1] Meyer J. и др. Facing the Challenges of Experiment Control and Data Management at ESRF-EBS / под ред. Schaa V.R. и др. JACoW Publishing, Geneva, Switzerland, 2023. С. 5.
[2] Raimondi P. и др. // Commun Phys. 2023. Т. 6, № 1. С. 82.
[3] Stach E. и др. // Matter. 2021. Т. 4, № 9. С. 2702–2726.
[4] Noack M.M. и др. // Sci Rep. 2020. Т. 10, № 1. С. 1325.
[5] Morris T.W. и др. // J Synchrotron Rad. 2024. Т. 31, № 6. С. 1446–1456.
[6] Smolentsev G., Soldatov A. // J Synchrotron Rad. 2006. Т. 13, № 1. С. 19–29.
[7] Smolentsev G., Soldatov A.V. // Computational Materials Science. 2007. Т. 39, № 3. С. 569–574.
[8] Guda S.A. и др. // Journal of chemical theory and computation. American Chemical Society, 2015. Т. 11, № 9. С. 4512–4521.
[9] Martini A. и др. // Computer Physics Communications. North-Holland, 2020. Т. 250. С. 107064.
[10] Kulaev K. и др. // ChemRxiv, 2025.

КЛЮЧЕВАЯ ЛЕКЦИЯ

КЛ-01

КЛ-01

Источник синхротронного излучения поколения 4+ с рентгеновским лазером на свободных электронах «СИЛА»: текущий статус и перспективы

Благов А.Е., Марченков Н.В., Пресняков М.Ю., Рожков А.Ю., Самарин А.В.,
Таргонский А.В., Царев Г.А., Якунин С.Н., Ковальчук М.В.
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
Targonsky_AV@nrcki.ru

Во исполнение Указа Президента Российской Федерации от 25.07.2019 № 356 «О мерах по развитию синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры в Российской Федерации» утверждена Федеральная научно-техническая программа развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на период до 2030 года и дальнейшую перспективу, которой предусмотрено создание уникальных научных установок класса «мегасайенс», головной научной организацией которой определен НИЦ «Курчатовский институт».

Флагманский проект программы – создание принципиально нового перспективного источника, превосходящего по техническим характеристикам действующие и проектируемые международные источники синхротронного излучения (г. Протвино, Московская область; далее – исследовательская установка «СИЛА»).

Уникальность проекта заключается в том, что исследовательская установка «СИЛА» объединит в себе синхротронный источник четвертого поколения, обладающий характеристиками, не уступающими ведущим синхротронным установкам мира (периметр более 1100 м, энергия электронов – 6 ГэВ, ток пучка – 200 мА, эмиттанс – 72 пм·рад), и рентгеновский лазер на свободных электронах, позволяющий проводить эксперименты со сверхвысоким временным разрешением.

Установка «СИЛА» предназначена для исследований, требующих экстремальных параметров излучения: высоких энергий (жесткого рентгеновского диапазона), высокой яркости, полной пространственной когерентности (для исследования одиночных молекул и вирусов), коротких во временно́м масштабе импульсов фотонов (изучение химических реакций и биологических процессов с нано- и пикосекундным временны́м разрешением).

Экспериментальный «парк» источника «СИЛА» будет включать в себя 52 научные станции (46 станций на кольцевом источнике синхротронного излучения и 6 станций на лазере на свободных электронах) мультидисциплинарного назначения.

Исследовательская установка «СИЛА» будет способствовать развитию прорывных технологий в области производства современных лекарственных средств, новых материалов, микроэлектроники, энергетики, природоподобных технологий и иных направлений, в совокупности формирующих принципиально новый базис российской экономики. Реализация проекта обеспечит исследовательские потребности научных и научно-производственных организаций России и стран ближнего зарубежья на десятки лет вперед.

В докладе будет представлен текущий статус реализации проекта.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ ПО СТАНЦИЯМ

УДс-1 ÷ УДс-13

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

УД-1 ÷ УД-34

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ МОЛОДЕЖНАЯ СЕКЦИЯ

УДм- 1 ÷ УДм-21

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ СПОНСОРЫ

УДсп

УДс-01

Экспериментальные возможности станции 1-1 «Микрофокус» ЦКП СКИФ

Шарафутдинов М.Р.[2,7], Дарьин А.В.[1], Дарьин Ф.А.[7], Ращенко С.В.[1,8], Ракшун Я.В.[1,2,3], Хомяков Ю.В.[2,7], Глушков Е.И.[4], Гоголев А.С.[5], Горбачев М.В.[6], Чернов В.А.[2]

1 – Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Институт ядерной физики имени. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

3 – Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, Новосибирск, Россия

4 – Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

5 – Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

6 – Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

7 – ЦКП «Сибирский кольцевой источник фотонов» ИК СО РАН, Кольцово, Россия

8 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия

marat@solid.nsc.ru

Основные направления работ на станции «Микрофокус» связаны с использованием сфокусированного (от единиц микрон до 200 нм) пучка СИ. На станции предполагается применение следующих методик:

- многоэлементный флуоресцентный анализ и картографирование, в том числе и совмещённое с рентгеновской дифрактометрией с разрешением до 200 нм,
- микротомография, включая и флуоресцентную, где контраст повышается при выборе энергии вблизи края поглощения,
- микро-XANES для определения химического состояния заданного элемента и его окружения
- рентгеноструктурный анализ монокристаллов in situ в ячейках высокого давления и температуры до 1 млн атм / 6000 K,
- порошковая дифрактометрия in situ в ячейках высокого давления до 3+ млн атм и температуре до 6000 K, достигаемой лазерным нагревом,
- рентгеновская микродифрактометрия включений,
- когерентный дифракционный имиджинг.

Для реализации указанных методик разработаны режимы работы: нанозонд, микрозонд со вторичным источником и без. Приведены расчетные параметры пучка на образце в этих режимах.

Благодарности: Работа поддержана госзаданиями Института геологии и минералогии СО РАН (122041400176-0 и 122041400214-9), грантом РНФ № 23-77-10047, госзаданием ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0042), госзаданием ИЯФ СО РАН (FWGM-2025-0036).

УДс-02

Экспериментальные возможности станции 1-2 «Структурная диагностика» ЦКП СКИФ

Винокуров З.С.[1], Зубавичус Я.В.[1], Шмаков А.Н.[1], Мищенко Д.Д.[1], Селютин А.Г.[1], Сыртанов М.С.[2], Гоголев А.С.[2], Денисов В.В.[3], Тересов А.Д.[3], Панченко Ю.Н.[3], Ковальский С.С.[3], Бескончин К.В.[3], Киселев В.Н.[3], Евдокимов А.А.[3], Андреев М.В.[3]

1 – ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – ТПУ, Томск, Россия

3 – ИСЭ СО РАН, Томск, Россия

z.s.vinokurov@srf-skif.ru

В докладе будут представлены технические параметры станции, а также доступные экспериментальные возможности (методики и экспериментальное оборудование). Круг актуальных экспериментальных задач включает исследование фазового состава, локальной атомной и электронной структуры, структурных превращений самых разнообразных веществ и материалов – катализаторов, минералов, функциональных и конструкционных материалов, материалов для энергетики и энергосбережения, для строительной индустрии, фармацевтической промышленности. На станции будут реализованы методики рентгеновской дифракции в диапазоне энергий излучения от 6 до 27 кэВ (длина волны от 1.907 Å до 0.459 Å) на следующих секциях:

Основным направлением работы секции 1-2-1 «Дифрактометрия высокого разрешения» будет получение экспериментальных рентгенограмм поликристаллических материалов с высоким угловым разрешением и низким соотношением «сигнал-шум» в широком интервале углов Брэгга за времена порядка нескольких минут при комнатной температуре и атмосферном давлении. Для экспериментов с высоким разрешением двухкружный (θ/2θ) дифрактометр оснащен 9 канальной системой регистрации на базе кремниевого фотоумножителя с LYSO (оксиортосиликат лютеция-иттрия) сцинтиллятором и 9 кристаллов анализаторов Si (111) на едином гониометре α/2α. Для время-разрешенных экспериментов *in situ* и *operando* дифрактометр оснащен позиционно-чувствительным однокоординатным детектором: угол захвата по 2θ 60°, разрешение 0.01°, 12×512 полосок, сенсор HR GaAs:Cr, скорость съемки 100 fps. В большинстве случаев образцы будут помещаться в тонкостенные кварцевые капилляры. При необходимости капилляр с образцом может быть нагрет или охлажден потоком воздуха или азота в диапазоне температур от 77 К до ~1300 К. В качестве дополнительного режима работы предусмотрены измерения аномального рассеяния с перестройкой энергии ондулятора. Помимо этого, дифрактометр оснащен 3-х координатным столиком на гониометре θ для размещения ячеек и реакторов, а также системой напуска газов и квадрупольным масс-спектрометром для контроля газовой фазы.

Основным направлением работы секции 1-2-2 «РСА монокристаллов» будет определение кристаллических структур различных соединений (в том числе макромолекулярных) с разрешением до 0.83 Å на энергии 18 кэВ (длина волны 0.689 Å) и до 1.5 Å на энергии 12.4 кэВ (длина волны 1.000 Å), соответственно. Возможно достижение лучшего разрешения за счет уменьшения длины волны до 0.459 Å. Для обеспечения полноты набора данных

дифрактометр оснащен 5-осевым гониометром с возможностью сканирования по ϕ и ω (фиксированный κ = 45°, SOC < 5 мкм при вращении кристалла по оси ϕ, SOC < 10 мкм при вращении кристалла по осям ϕ и ω) и тремя точными подвижками по направлениям x, y и z (шаг подвижки составляет 1 мкм). Для контроля температуры образца будет использоваться потоковый азотный криостат Cryostream 1000 (80-400 K). В качестве детектора будет использоваться гибридный детектор ADVACAM WidePIX 5x5 MPX3: число пикселей составляет 1280×1280, размер пикселя - 55×55 мкм^2 , 80 fps, сенсор CdTe 1000 мкм. Для контроля положения образца будет использоваться беспараллаксный осевой микроскоп: поле зрения от 300 мкм^2 до 3 мм^2, разрешение от 0.1 до 1 мкм^2, соответственно. На секции 1-2-2 будет реализована возможность автоматической смены образцов в удаленном режиме с использованием робота при охлаждении до температуры жидкого азота: 20 UniPucks (до 320 образцов), тип держателя SPINE, время смены < 30 с.

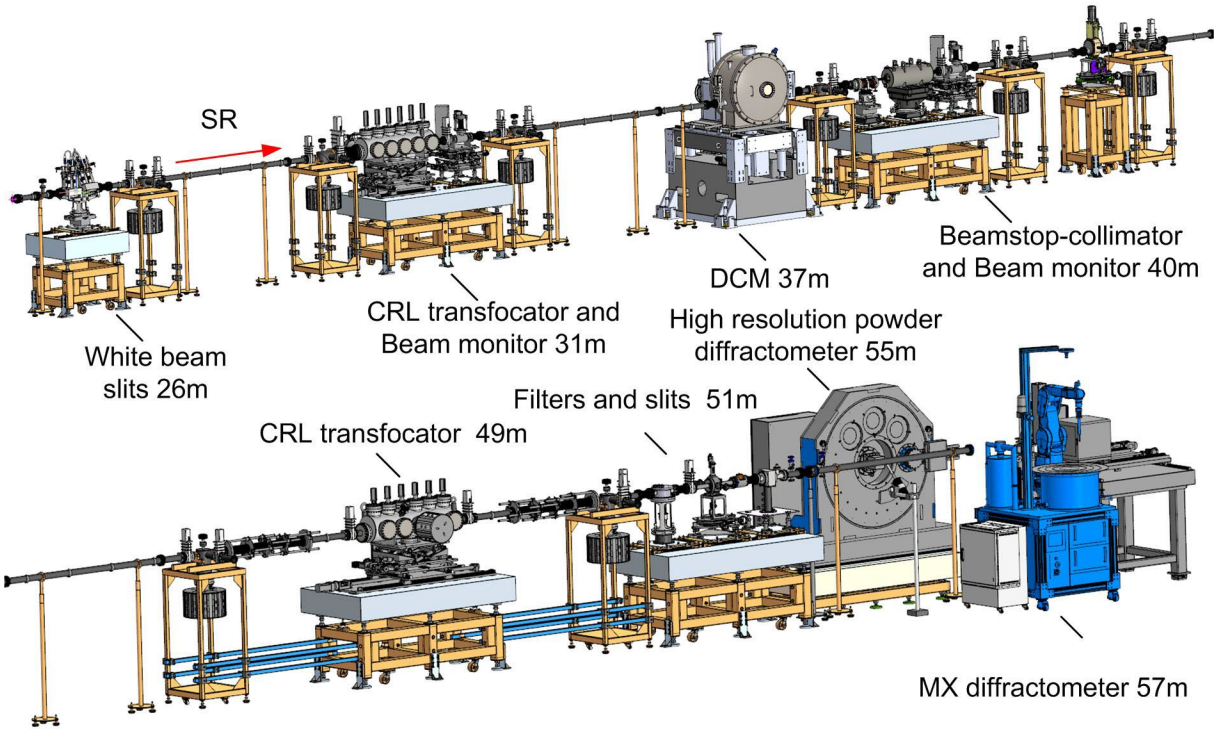


Рис. 1. Расположение оборудования станции 1-2 (дистанция в метрах от точки излучения)

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

УДс-03

Станция 1-3 «Быстропротекающие процессы». Научная программа

Рубцов И.А.[1], Бухтияров А.В.[1], Зубавичус Я.В.[1], Казанцев С.Р.[1], Купер К.Э.[1], Прууэл Э.Р.[2], Тен К.А.[2], Толочко Б.П.[3], Шехтман Л.И.[4]

1 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия

2 – Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

3 – Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

4 – Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

i.a.rubtsov@srf-skif.ru

Экспериментальная Станция 1-3 ЦКП «СКИФ» предназначена для исследования быстропротекающих процессов и состоит из двух секций, работающих последовательно: «Динамические процессы» и «Плазма». Основная задача Станции – исследование быстропротекающих процессов с характерными масштабами изменения процесса от пикосекунд до миллисекунд. Станция создается в рамках Государственного контракта с ИГиЛ СО РАН. В качестве источника синхротронного излучения на Станции используется сверхпроводящий вигглер с энергией фотонов до ≈30 кэВ.

Секция 1-3-1 «Динамические процессы» нацелена на исследования процессов, происходящих в условиях взрыва и импульсных ударных нагрузок. Основные направление работ на секции – исследование поведения вещества при интенсивных динамических воздействиях в условиях взрыва и импульсного лазерного излучения, в том числе изучение: структуры ударного и детонационного фронтов; фазовых переходов при сжатии; протекания химических реакций и динамического формирования наноструктур; скоростного деформирования и разрушения материалов, элементов конструкций.

Работа секции 1-3-2 «Плазма» будет направлена на исследование воздействия на материалы мощного импульсного нагрева, приводящего к деформации, возникновению механических напряжений и механическому разрушению материалов.

Основные методики, которые позволят решить поставленные научные задачи – это динамические методики, обладающие высоким временным разрешением: скоростная радиография (абсорбционная, фазоконтрастная), малоугловое рентгеновское рассеяние с высоким временным разрешением, дифракция с высоким временным разрешением. Все методики являются методиками in situ и operando. Минимальный интервал между кадрами будет составлять до 2,8 нс, а экспозиция порядка 50 пс.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

УДс-04
Станция 1-4 «XAFS-спектроскопия и магнитный дихроизм». Станция 1-7 «Базовые методы синхротронной диагностики для образовательной, исследовательской и инновационной деятельности студентов»

Сараев А.А.[1,2], Зубавичус Я.В.[1], Винокуров З.С.[1], Мищенко Д.Д.[1], Селютин А.Г.[1], Булавченко О.А.[1,2], Цыбуля С.В.[2,3], Архипов С.Г.[1], Федоров А.Ю.[1], Ковальский С.С.[4], Бескончин К.В.[4], Денисов В.В.[4], Бухтияров В.И.[2]

1 – ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – ИК СО РАН, Новосибирск, Россия

3 – НГУ, Новосибирск, Россия

4 – ИСЭ СО РАН, Томск, Россия

asaraev@catalysis.ru

В докладе будут представлены технические параметры станций 1-4 и 1-7, а также доступные экспериментальные возможности (методики и экспериментальное оборудование). Станция 1-4 предназначена для проведения исследований с использованием спектроскопии рентгеновского поглощения. Возможности станции «XAFS-спектроскопия и магнитный дихроизм» будут использованы при исследовании локальной пространственной, электронной и магнитной структуры широкого класса объектов, которые могут находиться в любом агрегатном состоянии. Важным преимуществом спектроскопии рентгеновского поглощения является элементная чувствительность с содержанием анализируемого элемента до 0.001%. Исследования будут охватывать множество научных областей, такие как физика твердого тела, материаловедение, геология, экология, неорганическая химия, коллоидная химия, гетерогенный и гомогенный катализ, микроэлектроника. Рабочий энергетический диапазон Станции 1-4 составляет 4.4-35 кэВ. На секции «Спектроскопия рентгеновского поглощения» будет реализовано две методики измерения спектров рентгеновского поглощения – в геометрии «на пропускание» и в режиме измерения выхода флуоресценции. Для регистрации флуоресцентных спектров будет использован 7 элементный энергодисперсионный кремниевый дрейфовый детектор. Станция оснащена широким набором in situ/operando ячеек для проведения высокотемпературных экспериментов, фотокаталитических и электрокаталитических исследований, а также для исследования процессов зарядки/разрядки в батареях.

Станция 1-7 реализует основные методы исследования кристаллических и аморфных материалов с использованием синхротронного излучения: спектроскопия рентгеновского поглощения, порошковая и монокристальная рентгеновская дифракция, включая режим in situ; а также рентгеновский флуоресцентный анализ. Основное внимание будет направлено на подготовку кадров (начинающие пользователи, повышение квалификации научных сотрудников, выполнение дипломных и аспирантских работ), освоению базовых синхротронных методик, работе с оптикой и экспериментальным оборудованием. Помимо учебных мероприятий, экспериментальная станция позволяет решать исследовательские и технологические задачи широкого спектра. В основе концепции станции лежит реализация

исследований синтетических и природных объектов комплексом структурных и спектральных экспериментальных методик. Круг актуальных экспериментальных задач включает исследование фазового, химического состава, локальной и электронной структуры, а также структурных превращений самых разнообразных веществ и материалов – катализаторов, минералов, функциональных и конструкционных материалов, материалов для энергетики и энергосбережения, для строительной индустрии, пигментов, белков, фармацевтических материалов. Рабочий энергетический диапазон Станции 1-7 составляет 4.4-30 кэВ. На секции «Спектроскопия рентгеновского поглощения» будет реализовано две методики измерения спектров рентгеновского поглощения – в геометрии «на пропускание» и в режиме измерения выхода флуоресценции. Для регистрации флуоресцентных спектров элементов будет использован многоэлементный энергодисперсионный детектор на основе высокочистого германия (HPGe). Основным направлением работы секции «Монокристальной дифракции» будет получение структур малых молекул и макромолекул. Дифрактометр Tongda TD-5000 оснащен 4-осевым гониометром: к = ±72°, ϕ = 360°, ω = ±90°, θ = -65+105°. Для контроля температуры образца будет использоваться потоковый азотный криостат (80-300 K). В качестве детектора будет использоваться детектор с рабочей областью 170×170 мм^2, размер пикселя 172×172 мкм^2, максимальная скорость съёмки 5 кадров/с, кремниевый сенсор толщиной 450 мкм.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

УДс-05

Станция первой очереди ЦКП СКИФ *«Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне»*

Купер К.Э.[1], Легкодымов А.А.[1], Завьялов П.С.[2], Макаров С.Н.[2], Скоков Д.В.[2]
1 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа имени Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН, Новосибирск, Россия
k.e.kuper@inp.nsk.su

Станция 1-5 станет базой для передовых научных экспериментов в областях медицины, материаловедения, геофизики, археологии и палеонтологии [1]. На станции будет реализовано ряд исследовательских методик с использованием высокоразрешающей рентгеновской микроскопии, дифракции и рассеяния рентгеновских лучей. Энергетический диапазон от 25 до 150 кэВ и высокая пространственная когерентность источника ЦКП «СКИФ» позволит использовать передовые методы фазово-контрастной радиографии для получения высококонтрастных изображений с микрометровым и субмикрометровым разрешением. В качестве источника высокоэнергетического излучения планируется использовать сверхпроводящий вигглер, который обеспечит высокий поток излучения на уровне 10^{11}-10^{13} фотон/сек./мм^2 в диапазоне энергий рентгеновских квантов от 30 до 150 кэВ. На станции планируется разместить две экспериментальные установки (секции), которые будут функционировать в последовательном режиме. Ближайшая к источнику секция будет на целена на исследования, проводимые с использованием рентгенофлуоресцентного и рентгеноструктурного анализа в высокоэнергетическом диапазоне. В конце канала будет размещена секция, позволяющая получать высококонтрастные изображения в рентгеновском диапазоне для медицинских исследований. Также на этой секции будет реализована возможность получать информацию в реальном времени о изменениях в структуре, которые происходят в индустриальных устройствах, находящихся в нагруженном состоянии. На всех секциях будет предусмотрена возможность работы как с полихроматическим излучением, с использованием рентгеновских фильтров, так и использование монохроматического излучения с полосой пускания на уровне $\Delta E/E=10^{-3}$.

Благодарности: Работа была выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] Купер К.Э. , Легкодымов А.А. , Дучков А.А. , Маликов А.Г. , Филиппов А.А. , Завьялов Е.Л. , Анчаров А.И. // Технологическая инфраструктура Сибирского кольцевого источника фотонов «СКИФ». Том 1. Экспериментальные станции первой очереди и Лабораторный комплекс. Т.1 –ИК СО РАН ,2022 –С.168-226.

УДс-06

Экспериментальная станция 1-6 «Электронная структура» ЦКП «СКИФ»

Бухтияров А.В.[1], Панафидин М.А.[1], Николенко А.Д.[1], Четырин И.А.[1], Голяшов В.А.[1], Терещенко О.Е.[1], Квон Р.И.[2], Просвирин И.П.[2], Бухтияров В.И.[2]

1 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия

2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

avb@catalysis.ru

Станция 1-6 предназначена для решения широкого спектра исследовательских и технологических задач методами фотоэлектронной спектроскопии с использованием синхротронного излучения в мягком рентгеновском диапазоне 10-2000 эВ. На станции реализованы две независимые методики: 1 – Метод фотоэлектронной спектроскопии высокого давления для проведения *in situ* и *operando* исследований состава и электронной структуры активного компонента в функционирующих каталитических системах различного типа при повышенном давлении, *in situ* исследований закономерностей процессов, приводящих к дезактивации/отравлению каталитических систем различного типа в зависимости от условий протекания реакции (состава реакционной среды, температуры, наличия отравляющих агентов и т.д.), *in situ* исследований инновационных функциональных материалов. 2 – Метод фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением, в том числе УФЭС, для проведения исследований электронной структуры поверхности твердых тел для приложений наноэлектроники и спинтроники. Таким образом, на станции размещены две секции - «Фотоэлектронная спектроскопия высокого давления» (ФЭС ВД) и «Фотоэлектронная спектроскопия с угловым и спиновым разрешением» (ФЭС УР). В докладе представлена информация о текущем состоянии дел по изготовлению и наладке научно-экспериментального оборудования Экспериментальной станции 1-6 «Электронная структура» ЦКП «СКИФ».

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” ФГБУН ФИЦ Институт катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

УДс-07

Применение методов глубокого обучения для измерения неразрешенной пористости по данным томографической съемки

Джаркинов Р.Б.[1,2], Пискунов С.А.[1], Шишаев Г.Ю.[1], Мерзликин Б.С.[1], Гоголев А.С.[1]
1 – Томский политехнический университет, Томск, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
gogolev@tpu.ru

Микрокомпьютерная томография (μCT) — важный инструмент для цифрового анализа геологических образцов, позволяющий строить цифровые модели керна с целью визуализации внутренней структуры, проведения численных экспериментов с целью оценки физических свойств и решения многих других задач [1]. В связи с истощением легкоизвлекаемых запасов нефти возрастает интерес к разработке низкопроницаемых коллекторов. При этом возникает проблема: значительная доля порового пространства внутри образцов имеет характерные размеры меньше пространственного разрешения μCT. Такие поры в трёхмерных моделях становятся субразрешёнными и недетектируемыми. Игнорирование субразрешённой пористости приводит к систематическому занижению общего показателя пористости и ошибкам при оценке физических свойств [2].

Одно из решений — контрастирование образца инертным газом (ксеноном). В таком случае томографическая съемка пары «сухой образец / насыщенный ксеноном» (рис. 1) и последующая обработка позволяют строить цифровые модели керна с учетом субразрешенной пористости [3].

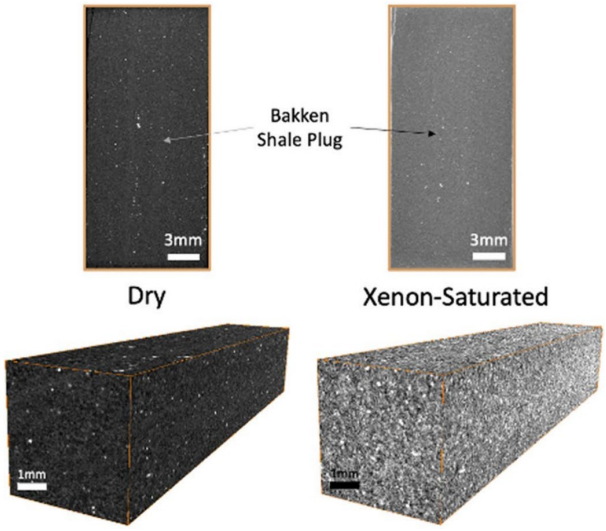


Рис. 1. 2D и 3D томографические данные сухого и насыщенного ксеноном образца (Bakken shale) [4].

Однако вышеописанный метод контрастирования требует специализированного оборудования, сложной подготовки и заметных затрат на ксенон, что ограничивает его применимость. В рамках данной работы предлагается альтернативное решение: детекция субразрешённой пористости по данным томографии без контраста с применением методов глубокого обучения. Для этого были подготовлены томографические изображения «без контраста / с ксеноном» и затем по данным без контраста предсказывается контрастированное изображение. Рассмотрены два класса моделей: свёрточные нейронные

сети (CNN) и диффузионные модели [5]. Диффузионная модель продемонстрировала высокую устойчивость к шуму в данных и воспроизводимость пространственных закономерностей распределения зон субразрешённой пористости, но абсолютные значения субразрешенной пористости отличаются из-за недостатка данных; для более точной детализации ей требуется существенно больший объём обучающих данных. Подход на основе CNN корректно восстанавливает структуру порового пространства и интегральные характеристики пористости, согласующиеся с томографическими изображениями с контрастом.

Итоговым результатом является построение 3D распределения пористости, где 100% будет соответствовать детектируемой на томографических данных пористости, а значения <100% - субразрешенная пористость с различным вкладом в полную пористостью (рис. 2). В итоге, полная пористость образца по данным томографии (12.0%) достаточна близка к лабораторным показаниям (13.6%).

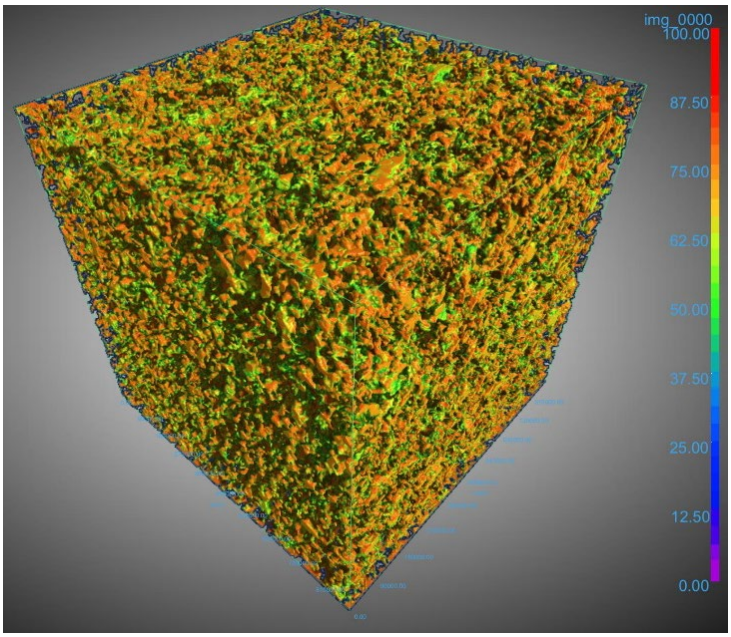


Рис. 2. 3D карта пористости по результатам применения CNN подхода. Цветом показана пористость.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российской Федерацией в лице Министерства науки и высшего образования РФ (Соглашение № 075−15−2025−510).

Литература:

[1] Bultreys T., Singh K., Raeini A.Q., Ruspini L.C., Øren P.-F., Berg S., Rücker M., Bijeljic B., Blunt M.J. Verifying pore network models of imbibition in rocks using time-resolved synchrotron imaging //Water Resources Research. — 2020. V. 56. P. e2019WR026587.

[2] Carrillo F. J., Soulaine C., Bourg I.C. The impact of sub-resolution porosity on numerical simulations of multiphase flow // Advances in Water Resources. 2022. Vol. 161. P. 104094.

[3] Ebadi M., Orlov D., Alekseev V., Burukhin A., Krutko V., Koroteev D. Lift the veil of secrecy in sub-resolved pores by Xe-enhanced computed tomography // Fuel. 2022. Vol. 328. P. 125274.

[4] Chakraborty N. et al. Measurement of in-situ fluid density in shales with sub-resolution porosity using X-ray microtomography //Transport in Porous Media. – 2022. – Т. 141. – №. 3. – С. 607-627.

[5] Ho J., Jain A., Abbeel P. Denoising Diffusion Probabilistic Models // Advances in neural information processing systems. Vol. 328. P. 6840–6851.

УДс-08

Проектирование и создание оборудования для экспериментальной станции 1-2 «структурная диагностика» ЦКП «СКИФ»

Денисов В.В.[1], Винокуров З.С.[2], Зубавичус Я.В.[2], Шмаков А.Н.[2], Мищенко Д.Д.[2], Селютин А.Г.[2], Ковальский С.С.[1], Бескончин К.В.[1], Тересов А.Д.[1], Сыртанов М.С.[1], Киселев В.Н.[1], Евдокимов А.А.[1], Панченко Ю.Н.[1], Андреев М.В.[1], Коновалов И.Н.[1]

1 – Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия

2 – Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук" (ЦКП "СКИФ"), Новосибирск, Россия

volodyadenisov@yandex.ru

В докладе представлена информация о текущем состоянии дел по изготовлению и наладке научно-экспериментального оборудования Экспериментальной станции 1-2 «Структурная диагностика» ЦКП «СКИФ». Разработка и создание целого ряда элементов проводились в относительно короткие временные циклы. На сегодняшний день технологии монтажа и сборки отдельных узлов и элементов станции, включая трансфокаторы, дифрактометр высокого разрешения, системы позиционирования, мониторы положения пучка флуоресцентные, визуализаторы пучка, опорные конструкции, в целом проверены, что подтверждается достигаемыми параметрами.

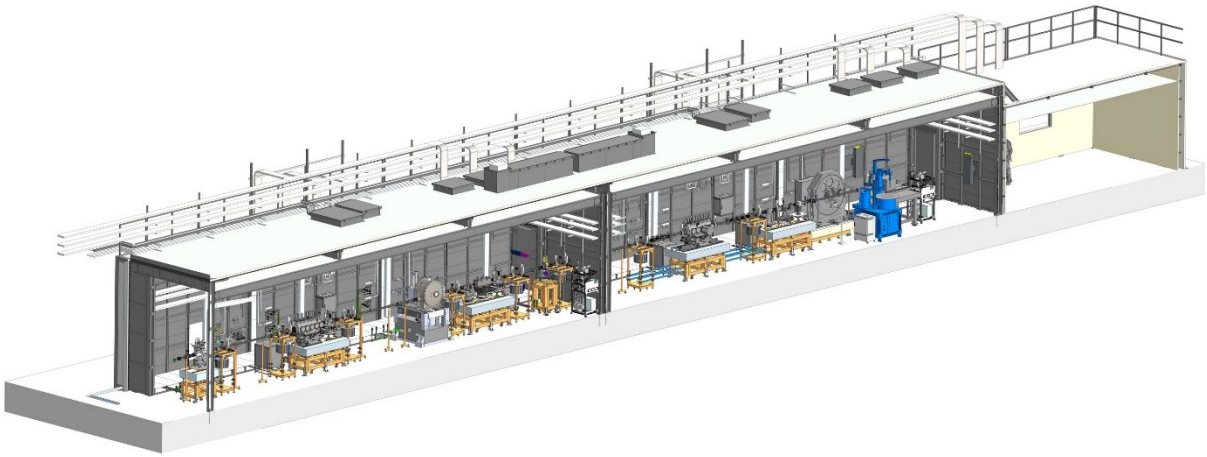


Рис. 1. Вид модели станции 1-2 "Структурная диагностика" ЦКП "СКИФ"

УДс-09

Станция 1-3 «Быстропротекающие процессы». Особенности создания

Прууэл Э.Р.[1], Студенников А.А.[1], Тен К.А.[1], Толочко Б.П.[2], Рубцов И.А.[3], Шехтман Л.И.[4]
1 – Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
3 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия
4 – Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия
pru@hydro.nsc.ru

Экспериментальная Станция 1-3 ЦКП «СКИФ» предназначена для исследования быстропротекающих процессов и состоит из двух секций, работающих последовательно: «Динамические процессы» и «Плазма». Основная задача Станции – исследование быстропротекающих процессов с характерными масштабами изменения процесса от пикосекунд до миллисекунд. В качестве источника синхротронного излучения на Станции используется сверхпроводящий вигглер с энергией фотонов до ≈30 кэВ. Станция создается в рамках Государственного контракта с ИГиЛ СО РАН с 2022 года.

В рамках исполнения контракта создано и ведется монтаж более 30 единиц уникального научного оборудования, в том числе уникальной взрывной камеры, пневматического устройства высокого давления, лазерной системы; различных оптических систем – прерывателя пучка, узла зеркал и набора щелей и систем детектирования – сверхскоростных одномерных рентгеновских детекторов со скоростью регистрации до 50 миллионов кадров в секунду.

В докладе будут представлены особенности создания станции и проблемы с которым столкнулась наша команда при исполнении контрактов.

УДс-10

Разработка оборудования фронтендов и экспериментальных станций первой очереди ЦКП «СКИФ» – опыт КТИ НП СО РАН

Завьялов П.С.[1], Макаров С.Н.[1], Скоков Д.В.[1], Купер К.Э.[2]

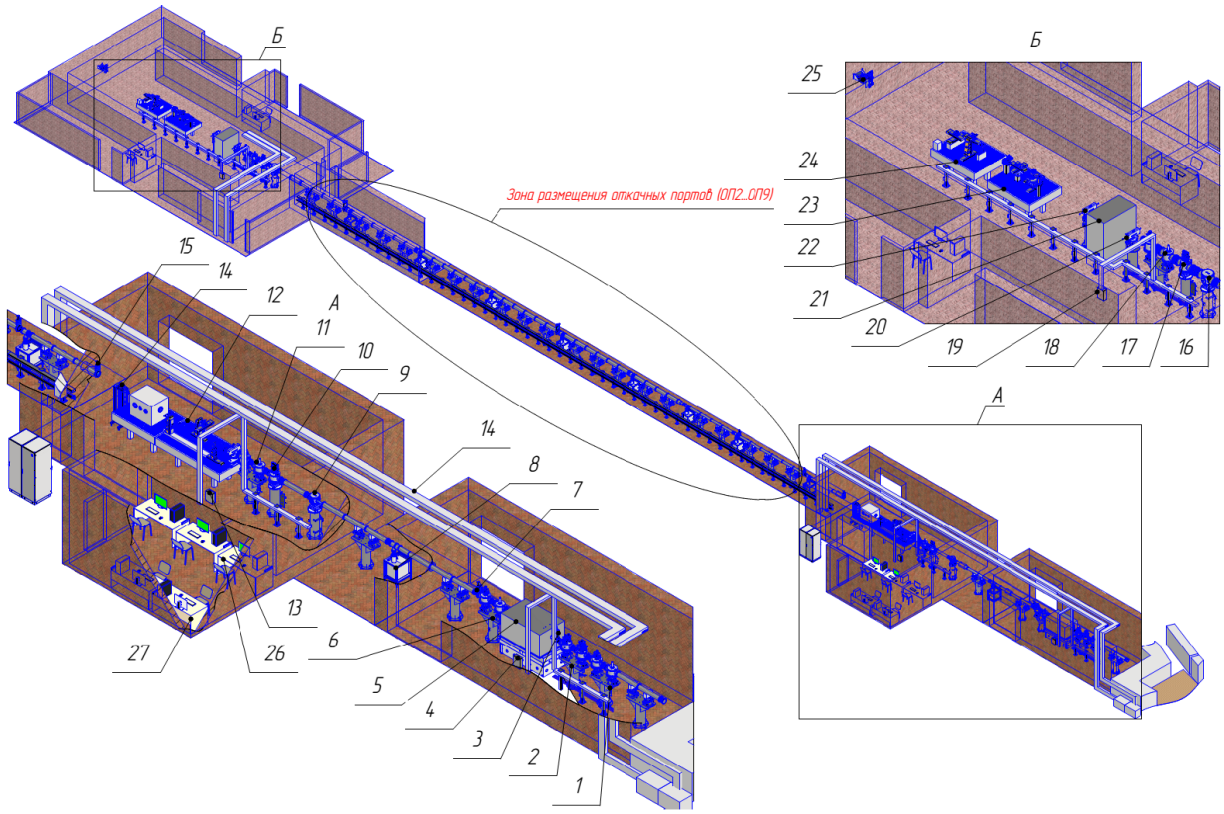
1 – Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа имени Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

zavyalov@tdisie.nsc.ru

Представлены результаты работ, выполненных Конструкторско-технологическим институтом научного приборостроения СО РАН (КТИ НП СО РАН), в рамках проекта создания установки класса Mega-science «Сибирский кольцевой источник фотонов (ЦКП «СКИФ») [1]. Разработано и изготовлено специализированное оборудование семи фронтендов для вывода сверхъярких пучков синхротронного излучения (СИ). В качестве источников излучения используются поворотные магниты, сверхпроводящие ондуляторы и вигглеры с мощностью пучков до 40 кВт. Фронтенды выполняют предварительное формирование пучка, фильтрацию спектра СИ, сопряжение сверхвысокого вакуума накопителя с вакуумными каналами экспериментальных станций, а также обеспечивают радиационную безопасность персонала, находящегося в помещениях проведения экспериментов.

Также разработан ряд элементов экспериментальных станций 1-1, 1-2, 1-3 очереди (люминесцентные мониторы пучков, блоки фильтров, рентгеновские щели и др.).



1, 6, 11, 18 – люминесцентные мониторы пучка, 2 – Ббблок рентгеновских коллиматоров с повышенной тепловой нагрузкой, 3, 7, 15 – шибер, 4, 13, 19 – шкаф распределительный, 5 – двухкристальный монохроматор (Лауэ), 8 – откачной вакуумный пост, 9, 16 – быстрые радиационные затворы, 10, 17 – блоки фильтров, 12 – экспериментальный стенд рентгеновской диагностики, 14, 25 – ловушки излучения, 20, 22 – блок рентгеновских коллиматоров, 21 – Пресс, 23 – блок размещения рентгеновских детекторов, 24 – блок размещения образцов, 26,27 – АРМ оператора.

Рисунок 1 – общий вид Станции 1-5.

Также в КТИ НП СО РАН разработан комплекс оборудования станции 1-5 «Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне» [2].

В состав Станции 1-5 входят две экспериментальные секции, реализующие ряд методик:

1-5-1: высококонтрастные изображения в рентгеновском диапазоне для медико-биологических (работа с лабораторными животными), палеонтологических и материаловедческих исследований;

1-5-3: исследования, проводимые с использованием рентгеновской микроскопии и томографии с субмикронным пространственным разрешением, рентгенофлуоресцентный анализ.

В работе описываются основные технические решения, рассказывается об опыте организации работ по импортозамещению и кооперации с российскими предприятиями при создании научного оборудования для синхротронных исследований.

Литература:

[1] Технологическая инфраструктура сибирского кольцевого источника фотонов "СКИФ": Сборник статей. В 3-х томах / Под общей редакцией К.И. Шефер, Составитель Е.Б. Левичев. Новосибирск: Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, 2022. – ISBN 978-5-906376-42-8. – EDN QEXRLK.

[2] Станция синхротронного излучения Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне, вчера, сегодня, завтра / K. E. Kuper, A. A. Legkodymov, P. Zavjalov [и др.] // Синхротронное излучение и лазеры на свободных электронах (СИ и ЛСЭ - 2024): Книга тезисов, Новосибирск, 24–28 июня 2024 года. – Новосибирск: Без издательства, 2024. – С. 110.

УДс-11

Экспериментальные станции второй очереди ЦКП «СКИФ»

Зубавичус Я.В., Бухтияров А.В.
ЦКП «СКИФ», Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия
ya.v.zubavichus@srf-skif.ru

В настоящее время в наукограде Кольцово Новосибирской области завершается создание источника синхротронного излучения поколения 4+ ЦКП «СКИФ». В рамках первой очереди запланирован запуск 7 экспериментальных станций: 1-1 «Микрофокус», 1-2 «Структурная диагностика», 1-3 «Быстропротекающие процессы», 1-4 «XAFS спектроскопия и магнитный дихроизм», 1-5 «Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне», 1-6 «Электронная структура», 1-7 «Базовые методы синхротронной диагностики для образовательной, исследовательской и инновационной деятельности студентов». Всего вокруг накопительного кольца ЦКП «СКИФ» может быть размещено 30 экспериментальных станций, включая 14 станций на специализированных многополюсных магнитных устройствах генерации (вигглерах, ондуляторах), 6 – на сильнопольных и еще 6 – на слабопольных поворотных магнитах. Хотя механизмы, объемы и сроки финансирования создания станций второй очереди не определены, заявлены планы завершить программу инфраструктурного развития ЦКП «СКИФ» с запуском всех 30 станций к 2035 году.

Силами сотрудников ЦКП «СКИФ» с активным участием заинтересованных групп пользователей со всей России идет разработка концептуальных проектов станций второй очереди. Разработаны эскизные проекты трех приоритетных станций второй очереди: 1-8 «Спектроскопия и метрология мягкого рентгеновского диапазона», 2-1 «Инженерное материаловедение», 2-2 «Белок».

Особенностью экспериментальных станций второй очереди станет факт использования излучения других спектральных диапазонов помимо рентгеновского, в частности, инфракрасного и ультрафиолетового. Для создания двух экспериментальных станций второй очереди («Изотоп», «Вирусология») потребуется проектирование и строительство отдельных зданий.

В докладе представлен текущий статус работ по разработке концепций экспериментальных станций второй очереди, принципы взаимодействия организаций, участвующих в данном процессе, критерии приоритезации функционала станций второй очереди.

Благодарности: Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН.

УДс-12

Вспомогательные исследования и пробоподготовка в Лабораторном корпусе ЦКП «СКИФ»

Гольденберг Б.Г.
Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов", Кольцово, Россия
b.g.goldenberg@srf-skif.ru

Лабораторный комплекс вспомогательных исследований и пробоподготовки ЦКП “СКИФ” является составной частью ЦКП “СКИФ” и размещается в отдельно стоящем лабораторном корпусе, соединенным переходами с основным зданием накопителя. В составе лабораторного корпуса предусмотрены отдельные блоки для лабораторных исследований, обучения пользователей и обработки результатов экспериментов, нацеленные на решение следующего круга задач:

- Физико–химическая пробоподготовка, в том числе специализированная: резка, полировка, обработка поверхности образцов реактивами, термическая и плазменная обработка, манипуляции в газовой атмосфере, проведение химических реакций,
- Выращивание и отбор белковых кристаллов и т.д.,
- Исследование на электронном и оптических микроскопах,
- Сервисная поддержка технологического оборудования в части оперативного изготовления элементов оснастки, отдельных узлов систем окружения образца, доработки деталей, сборки, регулировки и тестирования узлов и агрегатов, ремонт и профилактическое обслуживание,
- Создание комфортных условий для поддержки работы персонала и пользователей в режиме круглосуточной работы.

В докладе представлено состояние строительства лаборатного корпуса и перспективы организации работ для пользователей ЦКП «СКИФ».

УДс-13

Центр обработки данных. Текущее состояние

Потеряев В.С.
1 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия
v.s.poteryaev@srf-skif.ru

Центр обработки данных ЦКП «СКИФ» (ЦОД), является его составной частью и нацелен на обеспечение работы пользовательской инфраструктуры. Основные задачи центра – информатизация офисной деятельности, участие в системе управления ускорительно-накопительным комплексом, информатизация экспериментальных станций.

Виртуализация вычислительных ресурсов обеспечит управление экспериментальным оборудованием, быструю предварительную обработку полученных первичных данных, а также поддержку дополнительных ресурсоемких вычислений таких как молекулярная динамика или квантово-химические расчеты. На вычислительном кластере для решения задач структурной биологии и структурно-направленного дизайна фармпрепаратов будут доступны пакеты: ADVX, XDS, GROMACS, ORCA, Gamess, Haddock, Alphafold2, Anaconda и др.

В докладе будут представлены особенности и возможности Центра обработки данных ЦКП «СКИФ».

УД-01

Проект станции для исследования радиоактивных образцов (станция второй очереди ЦКП «СКИФ»)

Романчук А.Ю.[2], Тригуб А.Л.[1], Новичков Д.А.[2], Кузенкова А.С.[2], Петров В.Г.[2], Калмыков С.Н.[2]
1 – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
2 – Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
Trigub_AL@rrcki.ru

Применение рентгеновских методов с использованием синхротронного излучения показало высокую эффективность в решении важных задач радиохимии и радиоэкологии. Основная сложность при работе с радиохимическими образцами связана с низкими концентрациями целевых элементов и малыми массами исследуемых материалов (часто менее 1 мг). В таких условиях высокая яркость синхротронного пучка становится критически важной для качественной структурной диагностики и получения надежных данных.

Уникальными особенностями актинидов являются разнообразие зарядовых состояний и сложная электронная структура, что предъявляет повышенные требования к методическому оснащению экспериментальной станции. Для всестороннего изучения радиохимических образцов необходимо совмещение методов анализа атомарной и электронной структуры вещества.

В проектируемой станции предусмотрены следующие ключевые методы:

- Порошковая рентгеновская дифракция (XRD) для определения кристаллической структуры и фазового состава образцов;
- Метод дальней тонкой структуры поглощения (EXAFS), обеспечивающий количественное определение межатомных расстояний и координационных чисел;
- Околокраевая тонкая структура поглощения (XANES), применяемая для определения зарядового состояния и локальной электронной среды элементов;
- Спектроскопия по вторичному флуоресцентному излучению с высоким энергетическим разрешением (HERFD XAS), выполненная с целью повышения чувствительности, особенно в области M-краев актинидов.

Для работы с природными и неоднородными образцами предусмотрена возможность микрофокусировки синхротронного пучка до размера порядка 20×20 мкм. Это позволяет локально выбирать области исследования, повышая точность и информативность экспериментов.

В докладе будет представлена предварительный проект станции для исследования радиоактивных образцов.

УД-02

Подготовка кадров для синхротронных исследований: опыт Новосибирского государственного университета

Цыбуля С.В., Захаров Б.А., Болдырева Е.В.
Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
sergey.tsybulya@yandex.ru

Синхротронные исследования – неотъемлемая часть изучения веществ и материалов различной природы. Без них трудно представить себе развитие современных физики, химии, наук о Земле и других планетах, наук о материалах, биологии, фармации, медицины, а также технологий и методов диагностики материалов и изделий, археологических экспонатов, лекарственных препаратов, объектов культурного наследия, биологических объектов. В силу разнообразия задач, требующих для своего решения использования синхротронного излучения, для работ в центрах синхротронных исследований необходимы не только специалисты, обеспечивающие собственно создание и функционирование сложного современного оборудования, но и квалифицированные пользователи различных специальностей, способные поставить адекватные возможностям этого оборудования научные задачи, подготовить образцы, провести исследования, обработать и проанализировать результаты экспериментов, а также обеспечить их депонирование в форме, предполагающей возможность их последующего использования.

Подготовка кадров для ЦКП «СКИФ» и для квалифицированных синхротронных исследований в различных областях науки и технологий ведется на нескольких факультетах Новосибирского государственного университета (НГУ): физический факультет и факультет естественных наук делают это в рамках основных образовательных программ, геолого-геофизический, механико-математический факультет, факультет информационных технологий – в форме индивидуальных образовательных и исследовательских траекторий обучающихся.

Более пяти лет назад НГУ начал систематическую подготовку квалифицированных пользователей в рамках новой межфакультетской междисциплинарной магистерской программы «Методическое обеспечение физико-химических исследований конденсированных фаз» https://education.nsu.ru/master_methodical_provision/ [1]. Программа реализуется кафедрой Физических методов исследования твердых тел (каф. ФМИТТ) ФФ и кафедрой Химии твердого тела (каф. ХТТ) ФЕН. Программа востребована не только выпускниками бакалавриата НГУ, но и других вузов России. Дисциплины этой магистерской программы ежегодно посещают до 30-ти студентов факультета естественных наук (химики, биологи), физического и геолого-геофизического факультетов.

На физическом факультете НГУ реализуется полный цикл подготовки «бакалавриат-магистратура-аспирантура» по направлениям, связанным с синхротронными исследованиями. В бакалавриате студенты получают базовую подготовку по физике, математике, программированию, а также специализированные знания основ проектирования и эксплуатации синхротронных установок (кафедры физики ускорителей, физики

элементарных частиц, физико-технических исследований) и методов исследования объектов различной природы с использованием синхротронного излучения (кафедры физических методов исследования твердого тела, физики полупроводников, физики сплошных сред). В магистратуре физического факультета реализуются дисциплины магистерской программы «Синхротронные методы исследования» для всего потока магистрантов (70 - 80 обучающихся ежегодно), читаемые ведущими сотрудниками ЦКП «СКИФ».

Важным элементом подготовки кадров и повышения профессионального уровня являются стажировки преподавателей и студентов НГУ в синхротронных центрах за рубежом и в России. Обучение тесно связано с исследовательской и проектной деятельностью. Результаты исследовательских работ не только преподавателей, но и учащихся регулярно публикуются в ведущих научных журналах, докладываются на национальных и международных конференциях. Объединенная Секция каф. ФМИТТ ФФ и каф. ХТТ ФЕН «Физические методы в естественных науках и материаловедении» в рамках ежегодной Международной научной студенческой конференции, проводимой НГУ, собирает несколько десятков докладчиков из многих городов России и из-за рубежа.

Одним из наиболее успешных мероприятий, проводимых в НГУ в рамках подготовки кадров для синхротронных и нейтронных исследований, является проведение ежегодного Конкурса научно-исследовательских проектов обучающихся «Рентгеновские, синхротронные, нейтронные методы междисциплинарных исследований» (принцип проектного обучения). В 2022-2025 гг по результатам проведения этого конкурса была оказана финансовая поддержка 130-ти студенческим и аспирантским проектам. Важно отметить широту направлений исследований, охватывающих различные области науки: были выполнены проекты по исследованию структуры катализаторов, конструкционных материалов, полупроводников, молекулярных магнетиков, минералов, препаратов медицинского назначения. Некоторые работы имели методический характер, и их результаты будут полезны при постановке исследовательских методик в ЦКП «СКИФ».

НГУ наращивает переподготовку кадров и повышение квалификации по программам дополнительного профессионального образования в области синхротронных исследований. Разработаны и реализуются программы ДПО «Введение в синхротронные и нейтронные методы исследования. Биология» и «Синхротронные методы для решения задач в материаловедении». НГУ организует ежегодные Школы молодых ученых по синхротронным методам исследования в материаловедении https://www.nsu.ru/n/media/events/sobytiya-obrazovaniya/iv-shkola-molodykh-uchenykh-po-sinkhrotronnym-metodam-issledovaniya-v-materialovedenii/ и «Применение синхротронного излучения для решения задач биологии» https://www.nsu.ru/n/media/events/sobytiya-obrazovaniya/iv-shkola-molodykh-uchenykh-primenenie-sinkhrotronnogo-izlucheniya-dlya-resheniya-zadach-biologii/ .

Литература:

[1] Болдырева Е. В. // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14(1).С. 86-98.

УД-03

Опыт разработки и применения новых экспериментальных схем *operando* на станциях синхротрона Diamond

Статник Е.С.[1,2,3], Салимон А.И.[1,2], Корсунский А.М.[1,*]
1 – Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
2 – Университет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия
3 – Московский авиационный институт, Москва, Россия
[*]Professor Emeritus, Department of Engineering Science, University of Oxford
Eugene.Statnik@skoltech.ru

Diamond Light Source – синхротронный источник третьего поколения, с 2007 года являющийся ведущей платформой для междисциплинарных исследований в области физики твёрдого тела, материаловедения, биологии и макромолекулярной кристаллографии. Современное развитие синхротронных источников направлено на достижение предельных значений временного (до наносекундного) и пространственного (до нанометрового) разрешения, а также на внедрение *operando*-конфигураций, позволяющих осуществлять наблюдение эволюции сложных структурных и физико-химических процессов в реальном времени.

В качестве иллюстрации будут представлены результаты комбинированного применения синхротронной микротомографии и дифракции для изучения структуры и деформации реберной кости овцы [1]. Данная методология позволяет сопоставить трёхмерную архитектуру костной ткани с распределением микронапряжений под механической нагрузкой, обеспечивая уникальную связь между морфологией и механическим поведением биоматериала.

В заключение будут предложены соображения о возможных направлениях развития экспериментальной программы ЦКП СКИФ в свете насущных научно-технических задач, стоящих перед исследовательским сообществом российских ученых.

Благодарность: Работа выполнена в рамках Соглашения о предоставлении из федерального бюджета гранта на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технологического развития Минобрнауки России № 075-15-2024-552.

Список литературы:

[1]Statnik, E.S.; Salimon, A.I.; Besnard, C.; Chen, J.; Wang, Z.; Moxham, T.; Dolbnya, I.P.; Korsunsky, A.M. Ovine Bone Morphology and Deformation Analysis Using Synchrotron X-ray Imaging and Scattering. Quantum Beam Sci. 2020, 4, 29. https://doi.org/10.3390/qubs4030029

УД-04

Прямое рентгеновское зондирование ультрабыстрой динамики переноса заряда

Гельмуханов Ф.Х.[1,2], Кимберг В.В.[1,2], Краснов П.О.[1,3], Полютов С.П.[1,3]
Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
Королевский технологический институт (KTH), Стокгольм, Швеция
Федеральный сибирский научно-клинический центр ФМБА России, Красноярск, Россия
polyutov@mail.ru

Исследование ультрабыстрых процессов переноса заряда является критически важным для современных технологий в области энергетики, электроники и катализа. В работе на основе новой, из первых принципов, динамической теории сверхбыстрого переноса заряда, измерено время переноса заряда, с помощью резонансного оже-рассеяния. Данная работа продолжает развитие методов исследования динамики электронных процессов, начатое в работах, использующих в качестве стандарта время жизни рентгеновской дырки (core hole clock, CHC) [1, 2]. Классический метод CHC, широко применяемый для таких измерений, имеет фундаментальное ограничение, поскольку не учитывает, обнаруженное в наших экспериментах, прямое когерентное заселение полосы переноса заряда рентгеновским излучением. Этот фундаментальный пробел в теоретическом описании приводит к серьезным ошибкам и некорректным оценкам времени переноса, что ограничивает практическую применимость CHC метода.

Для преодоления этого ограничения нами была разработана основанная на первых принципах теория резонансного рассеяния через Фано состояние [3], являющееся когерентной суммой суперпозицией состояний экситона и континуума переноса заряда. На основе разработанной теории нами предложен новый метод измерения времени переноса заряда, где ключевым аспектом является анализ двумерной карты спектра резонансного оже-рассеяния (РОР), где в отличие от полосы переноса заряда экситонная полоса демонстрирует Рамановскую дисперсию (Рис.1). Меньший диаметр экситонного эллипса, равный сумме скорости переноса заряда и уширения конечного состояния, позволяет определить время переноса.

Теория была успешно применена для анализа экспериментальных РОР-спектров атомов ксенона, адсорбированных на золоте, полученных на синхротроне SOLEIL [4]. Тщательный анализ формы экситонного эллипса позволил получить значение времени переноса заряда 1.94 фс. Данное значение в пять раз превышает оценку, полученную по стандартной методике часов с дыркой в остове, что наглядно демонстрирует важность учета прямого заселения континуума. Большое энергетическое расщепление между экситоном и полосой переноса заряда в данной системе подавляет интерференцию Фано в конечном состоянии.

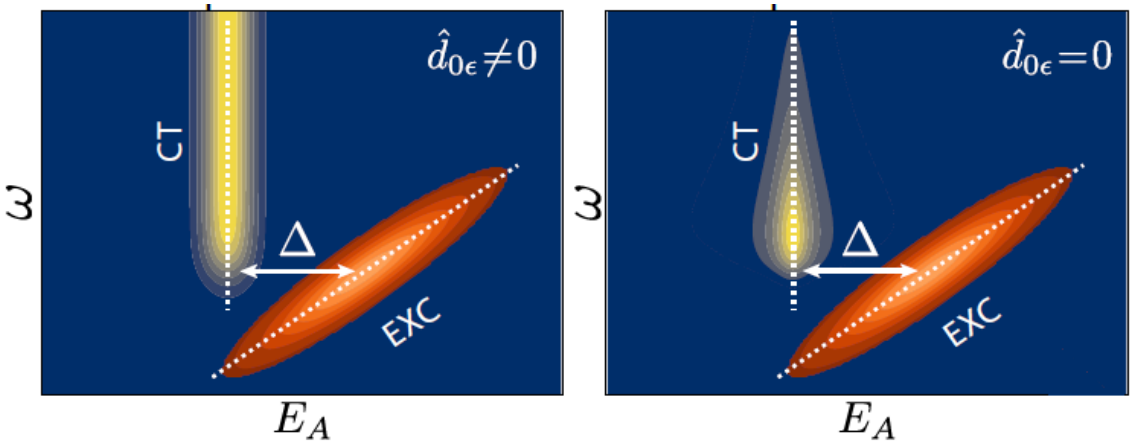


Рис. 1: Двумерная карта спектра в координатах (E_A, ω), демонстрирующая эллипсоидную форму экситонной полосы. Меньший диаметр экситонного эллипса соответствует сумме скорости переноса заряда и естественного уширения конечного состояния.

Разработанная методика обладает универсальным характером и имеет широкие перспективы практического применения в исследованиях переноса заряда в сложных системах [5,6]. В области катализа метод позволяет изучать процессы переноса заряда на границе раздела металл-адсорбат с атомарной точностью, что необходимо для разработки новых эффективных каталитических систем. В фотовольтаике методика предоставляет уникальную возможность измерять времена переноса заряда в органических полупроводниках и гетероструктурах [7], что критически важно для оптимизации эффективности солнечных элементов. Для молекулярной электроники метод открывает новые возможности исследования электронного транспорта через молекулярные junction-переходы. Разработанный подход создает основу для нового поколения исследований в области ультрабыстрой электронной динамики в конденсированных средах и на поверхностях раздела с фемто- и атто-секундным временным разрешением.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 25-12-00148).

Литература:

[1] Björneholm, O., Nilsson, A., Sandell, A., Hermiäs, B., Mårtensson, N. (1992). Physical Review Letters, 68(12), 1892.
[2] Brühwiler, P. F., Karis, O., Mårtensson, N. (2002). Reviews of Modern Physics, 74(3), 703.
[3] Fano, U. (1961). Physical Review, 124(6), 1866.
[4] Johansson, F. O. L., Berggren, E., Cornetta, L. M., Ceolin, D., Fondell, M., Ågren, H., Lindblad, A. (2023). Physical Review A, 107(3), 032802.
[5] Gel'mukhanov, F., Ågren, H. (1999). Physics Reports, 312(3-6), 87-330.
[6] Gel'mukhanov, F., Odelius, M., Polyutov, S. P., Föhlisch, A., Kimberg, V. (2021). Reviews of Modern Physics, 93(3), 035001.
[7] Johansson, F., Ivanovic, M., Swanström, S., Cappel, U. B., Peisert, H., Chassé, T., Lindblad, A. (2018). The Journal of Physical Chemistry C, 122(24), 12605-12614.

УД-05

Резонансная дифракция синхротронного излучения в кристаллах. Запрещенные отражения

Овчинникова Е.Н.[1], Орешко А.П.[1], Дмитриенко В.Е.[2]
1 – МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
2 – *Отделение «Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт",* Москва, *Россия*
ovtchin@mail.ru

Резонансная дифракция рентгеновских лучей (RXD) в последние два десятилетия развивалась как метод изучения локальных свойств кристаллов, таких как магнитное, зарядовое и орбитальное упорядочение, тепловые колебания и т. д., в отличие традиционной брэгговской дифракции, предназначенной, в основном, для изучения распределения электронной плотности (см. обзор [1] и ссылки в нем). Практическая реализация рентгеновских резонансных методов неразрывно связана с использованием источников синхротронного излучения (СИ), и возможностью «настройки» на резонансные энергии строго определенных химических элементов. Дополнительные возможности метода возникают вследствие того, что при энергии падающего излучения, близкой к краям поглощения атомов вещества, в амплитуде рассеяния возникают тензорные добавки, обусловленные локальной анизотропией атомного окружения или магнитными свойствами [2]. Так как эти добавки малы по сравнению с изотропной частью амплитуды рассеяния, то стараются найти такие брэгговские отражения, где изотропный вклад отсутствует – запрещенные отражения. Эти отражения содержат информацию о том физическом свойстве, которое является причиной возникновения анизотропной поправки к атомному фактору. Недостатком метода запрещенных отражений является то, что он применим к кристаллам, симметрия которых описывается несимморфными группами. Область применения может быть расширена за счет изучения слабых разрешенных отражений [3] или применения поляризационного анализа рассеянного излучения [4].

Для реализации метода резонансной дифракции СИ станция должна быть оснащена дифрактометром, позволяющим не только находить положения брэгговских отражений, но также осуществлять азимутальное вращение образца вокруг нормали к отражающей плоскости. Важным является знание поляризации падающего излучения, анализ поляризации рассеянного излучения в ряде случаев бывает также очень полезен. Таким образом, в одном эксперименте изучаются: угловое положение, спектральная, азимутальная и поляризационная зависимость интенсивности отражения, а также влияние на эти характристики внешних воздействий, например, температуры, электрического и магнитного полей, акустического воздействия и т.д. Совокупность этих экспериментальных данных позволяет восстановить особенности того физического свойства, которое привело к появлению запрещенного отражения. Теоретическое решение этой задачи требует квантовомеханических расчетов и математического моделирования с использованием сложных программных пакетов.

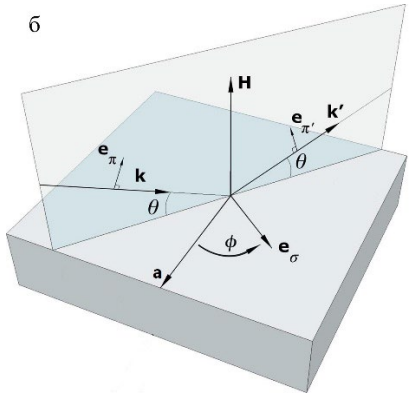


*Рис.1. Геометрия эксперимента, демонстрирующая ориентацию волновых векторов падающего **k** с поляризацией **e** и рассеянного **k**′ с поляризацией **e**′ относительно кристалла. **H** – вектор обратной решетки, **a** – одна из осей кристалла, ϑ – угол Брэгга, φ - азимутальный угол.*

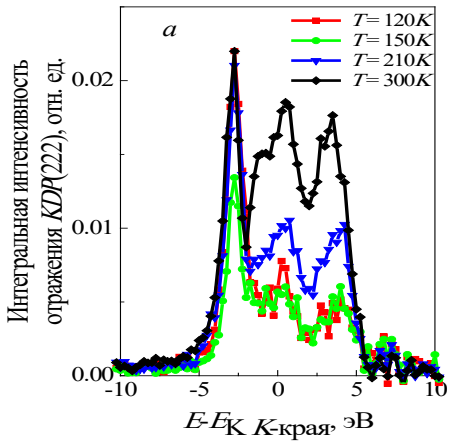


Рис. 2. Экспериментальные температурные зависимости спектров интегральной (по углу) зависимости запрещенного брэгговского дифракционного отражения (222) в кристалле KDP вблизи K-края поглощения калия (3,608 КэВ) при значении азимутального угла 62° [5].

В некоторых случаях запрещенные отражения могут быть вызваны наличием сразу нескольких анизотропных факторов [1], что сильно затрудняет расчеты. В основном, используется приближение, где анизотропный вклад в амплитуду рассеяния является суммой вкладов, отвечающих каждому анизотропному фактору в отдельности. В спектральных зависимостях таких запрещенных отражений проявляется интерференционный характер резонансного рассеяния, где важную роль играют фазы рассеянных волн. Это дает дополнительную информацию для интерпретации результатов и позволяет существенно продвинуться в понимании физического состояния атомов в кристаллах, причём различать даже состояния атомов одного элемента, находящиеся в различных кристаллографических позициях [6]. Многочисленные примеры таких исследований, проведённых в последнее время, показывают их информативность и важность для дальнейшего прогресса в этой области науки.

Литература:

[1] Овчинникова Е.Н., Орешко А.П., Дмитриенко В.Е.// УФН. 2025.Т.195. С.416-424.
[2] Dmitrienko V.E., Ishida K., Kirfel A., Ovchinnikova E.N.// Acta Cryst. 2005. A 61. P.481-490.
[3] Richter C., Zschornak M., Novikov D. et al. // Nat. Commun. 2018. V. 9. 178 (1–9).
[4] Овчинникова Е.Н., Козловская К.А., Дмитриенко В.Е., Орешко А.П.// Письма ЖЭТФ**.** 2019. Т.110**. С.** 563-568.
[5] Beutier G. Collins S. P., Nisbet G., et al. // Phys. Rev. 2015. V.92. № 214116 (1-11).
[6] Lawrence Bright E., Ovchinnikova E.N., Harding L.M., et al. //Phys. Rev. 2024. B 110**.** 125138.

УД-06

In-line когерентная рентгеновская оптика: три десятилетия развития

Снигирев А.А.,
Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, Россия
anatoly.snigirev@gmail.com

Три десятилетия назад, с появлением синхротронных источников третьего поколения, открылась уникальная возможность использования их высокой когерентности для задач визуализации – была продемонстрирована практическая реализация метода *in-line* фазового контраста для рентгеновского излучения. Эта работа положила начало целому направлению, которое сегодня стало одним из ключевых инструментов для исследования структуры и свойств вещества в материаловедении, биологии и медицине.

Метод *in-line* фазового контраста оказался исключительно простым и эффективным способом получения информации о слабо-поглощающих объектах. Его развитие привело к широкому внедрению на современных синхротронах и лазерах на свободных электронах.

Следующим логическим шагом в развитии *in-line* когерентной рентгеновской оптики стало применение эффекта преломления для фокусировки и транспортировки рентгеновского излучения. Были предложены и реализованы составные преломляющие линзы (CRL – compound refractive lenses), которые сегодня стали стандартным инструментом синхротронной оптики. Преломляющая оптика позволяет формировать микронные и субмикронные пучки, что открыло новые возможности для микроскопии и томографии.

За три десятилетия *in-line* фазовый контраст и рентгеновская преломляющая оптика превратились из экспериментальных идей в фундаментальные инструменты современной науки. Они определяют облик экспериментальных станций на новых источниках и продолжают находить всё более широкие применения – от фундаментальных исследований до медицинской диагностики.

Путь от первых демонстраций фазового контраста до современной комплексной рентгеновской оптики показывает, насколько мощным и универсальным инструментом может быть когерентное рентгеновское излучение. Перспективы дальнейшего развития связаны с источниками 4-го поколения, а также с интеграцией оптики, фазовых методов и современных детекторов в единые платформы для in situ и in vivo исследований.

УД-07

Текущие экспериментальные возможности экспериментальной станции «Белок/РСА» Курчатовского источника синхротронного излучения и обзор ярких результатов, полученные в 2024/2025 годах

Лазаренко В.А., Дороватовский П.В., Светогоров Р.Д.
НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия
Vladimir.a.lazarenko@gmail.com

Монокристальная рентгеновская дифракция остается самым широко используемым и востребованным методом для исследования кристаллических веществ различной сложности при решении задач структурной химии и биологии. Использование источника синхротронного излучения для решения задач такого типа дает возможность получать данные высокого качества и разрешения в наикратчайшее время.

Исследования в области структурной химии и биологии являются одним из этапов огромного количества научных разработок в современном мире, в связи с тем, что знание строения вещества помогает подтвердить правильность синтеза, 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 соединений (элементарная ячейка с параметрами 5-15 ангстрем) 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 2024/2025 года.

Литература:

[1] Lazarenko V.A., Dorovatovskii P.V., Zubavichus Y.V., Burlov A.S., Koshchienko Y.V.,Vlasenko V.G., Khrustalev V.N., 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.

УД-08

Рентгеноструктурный анализ в создании лекарственных препаратов на основе ингибиторов ферментов репарации ДНК

Дырхеева Н.С., Лаврик О.И.
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск, Россия
lavrik@1bio.ru

Репарация ДНК относится к числу основных стратегий живых организмов, обеспечивающих сохранение целостности генома и, как следствие, здоровья человека. Дефекты систем репарации приводят к возникновению онкологических и нейродегенеративных заболеваний, а также старению. С другой стороны, активность репарации ДНК необходимо ингибировать для повышения эффективности действия ДНК-повреждающих агентов, используемых в химио и радиотерапии. В связи с этим ферменты репарации ДНК являются признанными мишенями для создания лекарств в терапии онко-и нейродегенеративных заболеваний [1]. Важнейшими универсальными мишенями для разработки лекарственных препаратов являются поли(ADP-рибоза)полимеразы 1 и 2 (PARP1/2) [2], участвующие в регуляции репарации ДНК. Основные клинические препараты, используемые в терапии ряда онкологических заболеваний, являются ингибиторами PARP. Еще одна перспективная мишень для создания препаратов онкотерапии – тирозил-ДНК-фосфодиэстераза 1.

В докладе будут рассмотрены данные рентгеноструктурного анализа ферментов репарации и современные стратегии разработки ингибиторов ферментов репарации ДНК, в том числе за счет модуляции белок-белковых взаимодействий [3], что позволит разработать эффективную и менее токсичную терапию онкологических и нейродегенеративных заболеваний. Будут представлены последние данные по исследованию выявленных нами ингибиторов тирозил-ДНК-фосфодиэстеразы 1 в качестве потенциальных противораковых препаратов.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания ИХБФМ СО РАН № 125012300658-9.

Литература:

[1] 1. Zakharenko A., Dyrkheeva N., Lavrik O. Med. Res. Rev. 2019, 39, 1427.
[2]. Alemasova E.E., Lavrik O.I. Nucleic Acids Res. 2019, 47, 3811.
[3]. Chernyshova I., Vasil'eva I., Moor N., Ivanisenko N., Kutuzov M., Abramova T., Zakharenko A., Lavrik O. Int. J. Mol. Sci. 2024, 25, 12526.

УД-09

Исследование РНК-белковых комплексов с использованием синхротронного излучения

Никулин А.Д., Панкратова П.Ю., Михайлина А.О., Леконцева Н.В.
Институт белка Российской академии наук, Пущино, Россия
nikulin@vega.protres.ru

Исследование регуляции экспрессии генов – важная научная проблема, поскольку именно этот процесс, в конечном счете, определяет состояние и функцию каждой живой системы (клетки или организма). Экспрессия генов регулируется на нескольких уровнях, таких как транскрипция, трансляция и пост-трансляция, причем в эти процессы непосредственно вовлечены ДНК/РНК-связывающие белки. Для полного описания этих процессов необходимо знать не только физико-химические параметры, но и структурные особенности взаимодействия макромолекул. Несмотря на активное развитие криоэлектронной микроскопии и методов моделирования структур макромолекул, рентгеноструктурный анализ РНК-белковых комплексов остается ведущим прямым методом определения структур таких сложных объектов. Из-за большого молекулярного веса и, как правило, небольших размеров кристаллов, дифракционные данные высокого разрешения от кристаллов РНК-белковых комплексов можно получить только с использованием синхротронного излучения.

В Институте белка РАН накоплен большой опыт определения и анализа структур макромолекулярных комплексов методом рентгеноструктурного анализа [1]. Текущий проект направлен на исследование взаимодействия белковых РНК-шаперонов с регуляторными участками мРНК и нетранслируемых регуляторных РНК в клетках *Mycobacterium tuberculosis*. На основе имеющихся структурных данных для гомологичных белков нами созданы модели взаимодействия белков CspA и CspB из *M. tuberculosis* с короткими фрагментами ДНК и РНК. Стабильность структур полученных моделей комплексов оценена методами молекулярной динамики [2]. Проведен скрининг условий кристаллизации исследуемых белков и РНК-белковых комплексов, найдены условия формирования кристаллов для некоторых из них. Определение и анализ структур РНК-белковых комплексов из *M. tuberculosis* может послужить базой для разработки новых терапевтических подходов для лечения заболевания туберкулезом и преодоления антибиотикорезистентности этого патогена.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-24-00071.

Литература:

[1] Тищенко С.В., Михайлина А.О., Леконцева Н.В., Столбоушкина Е.А., Никонова Е.Ю., Никонов О.С., Никулин А.Д. // Кристаллография. 2021. Т.66. С. 697-707.
[2] Pankratova P.Yu., Lekontseva N.V., Nikulin A.D. // In Silico Research in Biomedicine. 2025. V. 1. DOI: 10.1016/j.insi.100033.

УД-10

Кристаллография рибосом как инструмент для фармакологии

Усачев К.С.[1,2,3], Юсупов М.М.[1,2,4]
1– НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия.
2 – ФИЦ «Казанский научный центр РАН», Казань, Россия
3 – Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
4 – IGBMC, University of Strasbourg, Illkirch, France
k.usachev@knc.ru

Рентгеновская кристаллография рибосом остается ключевым инструментом современной фармакологии, позволяя анализировать с атомарным разрешением, как различные препараты (антибиотики, антимикотики, противовирусные и противоопухолевые средства) связываются со своей мишенью и останавливают процесс биосинтеза белка [1]. Рибосома – это рибонуклеопротеиновый комплекс массой ~4.2 МДа, ответственный за процесс трансляции. Несмотря на бурное развитие крио-электронной микроскопии (крио-ЭМ), не требующей получения кристаллов, рентгеновская кристаллография по прежнему сохраняет свои преимущества. Кристаллическая решётка стабилизирует конформационно-подвижные участки рибосомы, что позволяет с высокой чёткостью определять положение малых молекул лигандов и подвижных фрагментов боковых цепей. Кристаллография рибосом сопряжена с трудностями при сборе дифракционных данных, обусловленными крупными размерами элементарной ячейки (299.18Å 294.18Å 450.09Å 90.00º 100.05º 90.00º). С увеличением размеров элементарной ячейки расстояние между отражениями на дифракционной картине сокращается, что приводит к их наложению и перекрыванию. Для регистрации таких сложных дифракционных картин необходимы современные синхротронные источники, способные генерировать высокоинтенсивное коллимированное рентгеновское излучение.

В данной работе мы разработали новый протокол кристаллизации эукариотической рибосомы из патогенных дрожжеподобных грибов *Candida albicans* [2]. Этот подход впервые позволил визуализировать связывание ингибиторов в функциональных центрах эукариотической рибосомы, что было недостижимо для классического объекта — рибосом *Saccharomyces cerevisiae*. Проблема заключалась в том, что для получения высокого разрешения кристаллов *S. cerevisiae* требовалось введение тяжёлых атомов (гексаамминосмий) на посткристаллизационной стадии. Эти атомы, однако, часто занимали ключевые функциональные сайты, вытесняя малые молекулы и делая невозможным анализ механизма связывания ингибиторов.

Методом рентгеновской кристаллографии и крио-электронной микроскопии были определены с высоким разрешением (3 Å) структуры рибосомы *Candida albicans* и ее комплексов с лигандами [2,3]. На основе этих данных впервые установлен механизм устойчивости к антибиотику циклогексимиду. Кроме того, выявлены общие закономерности в механизме синергического действия антибиотиков-аминогликозидов и антималярийного препарата мефлохина, повышающего эффективность подавления нонсенс-мутаций. Полученные результаты открывают перспективы для разработки более безопасных и

эффективных методов терапии генетических заболеваний, основанных на комбинации аминогликозидов с индукторами прочитывания стоп-кодонов.

Таким образом, новые кристаллографические структуры функциональной рибосомы не только проясняют структурные основы её активности, но и открывают возможности для целенаправленной разработки новых лекарственных препаратов.

Литература:

[1] Nurullina L.I., Biktimirov A.D., Yusupov M.M., Usachev K.S. Evolution of ribosome X-ray crystallography: from first crystals to atomic resolution // Biophysical Reviews. – 2025. https://doi.org/10.1007/s12551-025-01357-z

[2] Kolosova O., Zgadzay Yu., Stetsenko A., Sukhinina A.P., Atamas A., Validov Sh., Rogachev A., Usachev K., Jenner L.B., Dmitriev S.E., Yusupova G., Guskov A., Yusupov M. Mechanism of the read-through enhancement by aminoglycosides and mefloquine // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 2025. – Vol. 122 (17). – P. e2420261122.

[3] Zgadzay Y., Kolosova O., Stetsenko A., Wu Ch., Bruchlen D., Usachev K., Validov Sh., Jenner L., Rogachev A., Yusupova G., Sachs M.S., Guskov A., Yusupov M. E-site drug specificity of the human pathogen Candida albicans ribosome // Science Advances. – 2022. – Vol. 8. – article number eabn1062.

УД-11

Экспериментальная станция «Серийная макромолекулярная кристаллография» на источнике синхротронного излучения 4-го поколения «СИЛА»

Дороватовский П.В., Лазаренко В.А., Светогоров Р.Д.
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
Paulgemini@mail.ru

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]**. Источник излучения был выбран ондулятор, который покроет 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.

Литература:

[1] Ursby T. 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. C817-C817.
[2] Pearson A. R., Mehrabi P. Serial synchrotron crystallography for time-resolved structural biology //Current Opinion in Structural Biology. – 2020. – Т. 65. – С. 168-174.

УД-12

Рентгеновская фазоконтрастная микротомография для исследования биологических объектов

Бузмаков А.В.[1], Кривоносов Ю.С.[1], Дьячкова И.Г.[1], Золотов Д.А.[1], Гулимова В.И.[2], Юнеман О.А.[2], Савельев С.В.[2], Букреева И.Н.[3], Асадчиков В.Е.[1]

1 – НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

2 – НИИ морфологии человека ФГБНУ "РНЦХ им. акад. Б.В. Петровского", Москва, Россия

3 – Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

buzmakov@gmail.com

Методы рентгеновского фазового контраста в последние годы находят всё более широкое применение для решения задач трёхмерной томографической визуализации сложных объектов. Особенно актуальными они оказываются при исследовании биологических тканей и образцов, где традиционные методы рентгеновской абсорбционной томографии не обеспечивают достаточной информативности. Это связано с тем, что коэффициенты поглощения рентгеновского излучения у многих органических веществ, из которых состоят клетки и ткани, отличаются крайне незначительно. В таких случаях для достоверного распознавания структурных элементов необходима дополнительная чувствительность к изменениям в фазе волны излучения, проходящей через образец. Именно эту возможность предоставляет фазоконтрастная томография, которая позволяет регистрировать изменения показателя преломления, что существенно повышает информтивность реконструкций.

Среди различных подходов к фазоконтрастным методам наиболее простым и универсальным в практической реализации является метод осевого («in-line») фазового контраста. Его ключевым преимуществом выступает отсутствие необходимости в сложных интерферометрических схемах или дорогостоящих оптических элементах, таких как фазовые пластинки Френеля или кристаллы-анализаторы. Благодаря этому он гораздо менее чувствителен к механическим вибрациям и температурной нестабильности экспериментальной установки, что делает его особенно удобным как для работы на крупных синхротронных источниках, так и для применения в условиях компактных лабораторных систем. Простота реализации метода открывает возможности для проведения большого числа экспериментов и адаптации методики под разнообразные задачи биомедицины и материаловедения.

В ходе нашей работы были проведены обширные микротомографические исследования серии биологических образцов различной природы — от тканей нервной системы до костных структур. Эксперименты выполнялись как на высокоинтенсивных синхротронных источниках излучения, так и на современных лабораторных рентгеновских микротомографах, что позволило провести сопоставление режимов фазового и абсорбционного контраста в широком диапазоне энергий от 8 до 30 кэВ. Особое внимание уделялось оптимизации параметров эксперимента и алгоритмов реконструкции, чтобы достичь максимально возможного разрешения и контрастности. В результате удалось получить изображения с пространственным разрешением до 0.5 мкм, что является крайне высоким показателем для методов неразрушающей диагностики. Это дало возможность визуализировать отдельные

нейроны, клетки и даже их морфологические особенности внутри исследуемых образцов, что открывает перспективы для глубокого анализа организации биологических тканей в трёхмерном представлении.

В предстоящем докладе будут подробно представлены наши экспериментальные результаты, включая примеры реконструкций и сравнительный анализ изображений, полученных в различных режимах контрастирования. Будут рассмотрены применяемые алгоритмы обработки томографических данных, включая методы фазовой реконструкции и подавления артефактов, а также показаны преимущества их использования для задач структурной биологии. Отдельное внимание будет уделено обсуждению перспектив применения фазоконтрастной томографии на современных поколениях синхротронных источников и на новых лабораторных установках.

Благодарности: Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» в части проведения измерений и в рамках Соглашения № 075-15-2025-458 с Министерством науки и высшего образования РФ в части обработки фазоконтрастных изображений.

УД-13

Сканирующий и проекционный микроскопы станции 2-5 «Наноскопия в мягком диапазоне» для биологических исследований в «окне прозрачности воды»

Малышев И.В.[1], Реунов Д.Г.[1], Чхало Н.И.[1], Голышев С.А.[2], Казаков Е.П.[2], Кутькин О.М.[3,4], Ракшун Я.В.[3,5], Хомяков Ю.В.[3,4], Чернов В.А.[3], Седов А.А.[3]

1 – ИФМ РАН, Нижний Новгород, Россия

2 – НИИ ФХБ им. А.Н. Белозерского МГУ, Москва, Россия

3 – ИЯФ СО РАН, Новосибирск, Россия

4 – ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, Кольцово Россия

5 – ИГМ СО РАН, Новосибирск, Россия

Ilya-malyshev@ipmras.ru

В работе дается краткое описание концепции сканирующего и проекционного микроскопов станции 2-5 «Наноскопия в мягком диапазоне» второй очереди ЦКП «СКИФ». Микроскопы предназначены для изучения внутреннего строения клеток и динамических процессов в них с нанометровым пространственным разрешением. Работа микроскопов основана на высоком естественном абсорбционном контрасте между углеродосодержащими структурами и водой в спектральном диапазоне «окна прозрачности воды», λ = 2.3 – 4.3 нм, что исключает необходимость использования контрастирования и флурофоров, и минимизирует необходимые для получения высококачественных 3D изображений поглощенные в образцах дозы ионизирующего излучения. Приводятся сканирующая и проекционная схемы микроскопа, их основные технические характеристики, в том числе расчётные спектры и параметры ондуляторного источника, и оценка поглощенных доз в зависимости от разрешения. Предложенные микроскопы основаны на многослойных высокоапертурных объективах Шварцшильда, позволяющих резко увидеть фокальный срез образца.

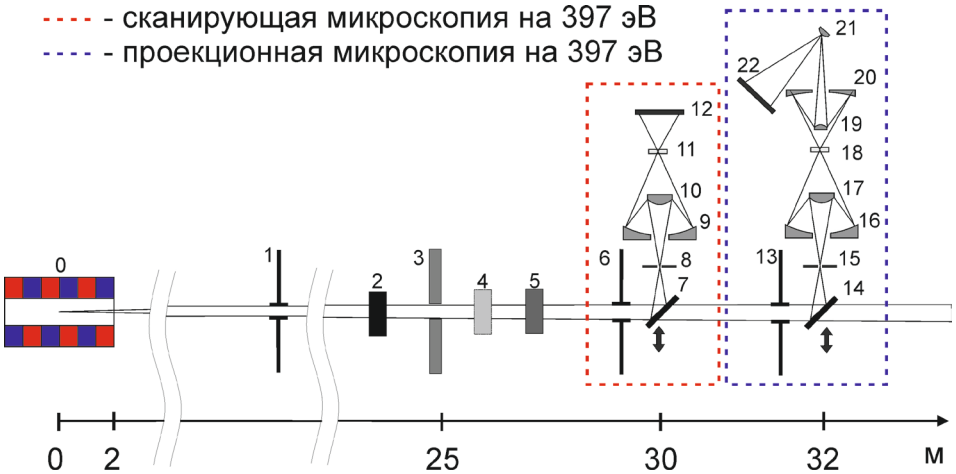


Рис. 1. Рентгенооптическая схема сканирующего и проекционного микроскопов станции «Наноскопия в мягком диапазоне»: 0 – спиральный ондулятор, 1 – апертура фронтэнда, 2 – радиационный затвор; 3 – стена биозащиты; 4 – аттенюатор; 5 – экспозиционный затвор; 6 – входная апертура блока сканирующего микроскопа; 7 – линза Брэгга-Френеля; 8 – пинхол (вторичный источник); 9, 10 – объектив Шварцшильда (фокус 10 нм); 11 – образец; 12 – фотодиод; 13 – входная апертура блока проекционного микроскопа; 14 – линза Брэгга-Френеля, 15 - пинхол (вторичный источник); 16, 17 – конденсорный объектив Шварцшильда; 18 – образец; 19, 20, 21 – изображающий трёхзеркальный объектив (увеличение 800 крат); 22 – матричный детектор

УД-13

Для восстановления трёхмерной структуры замороженных или высушенных образцов будет также использоваться технически простая аксиальная томография. В сканирующей схеме, благодаря малой дозе облучения, можно будет изучать живые клетки растений с разрешением до 10 нм, животных – с разрешением до 80 нм и криофиксированные образцы с разрешением до 5 нм [1]. В проекционной схеме, за счёт одномоментного наблюдения всего ХУ-фокального среза, существенно уменьшено время получения трёхмерных изображений, но за счёт большой дозы, она будет ориентирована в основном для изучения фиксированных образцов [2].

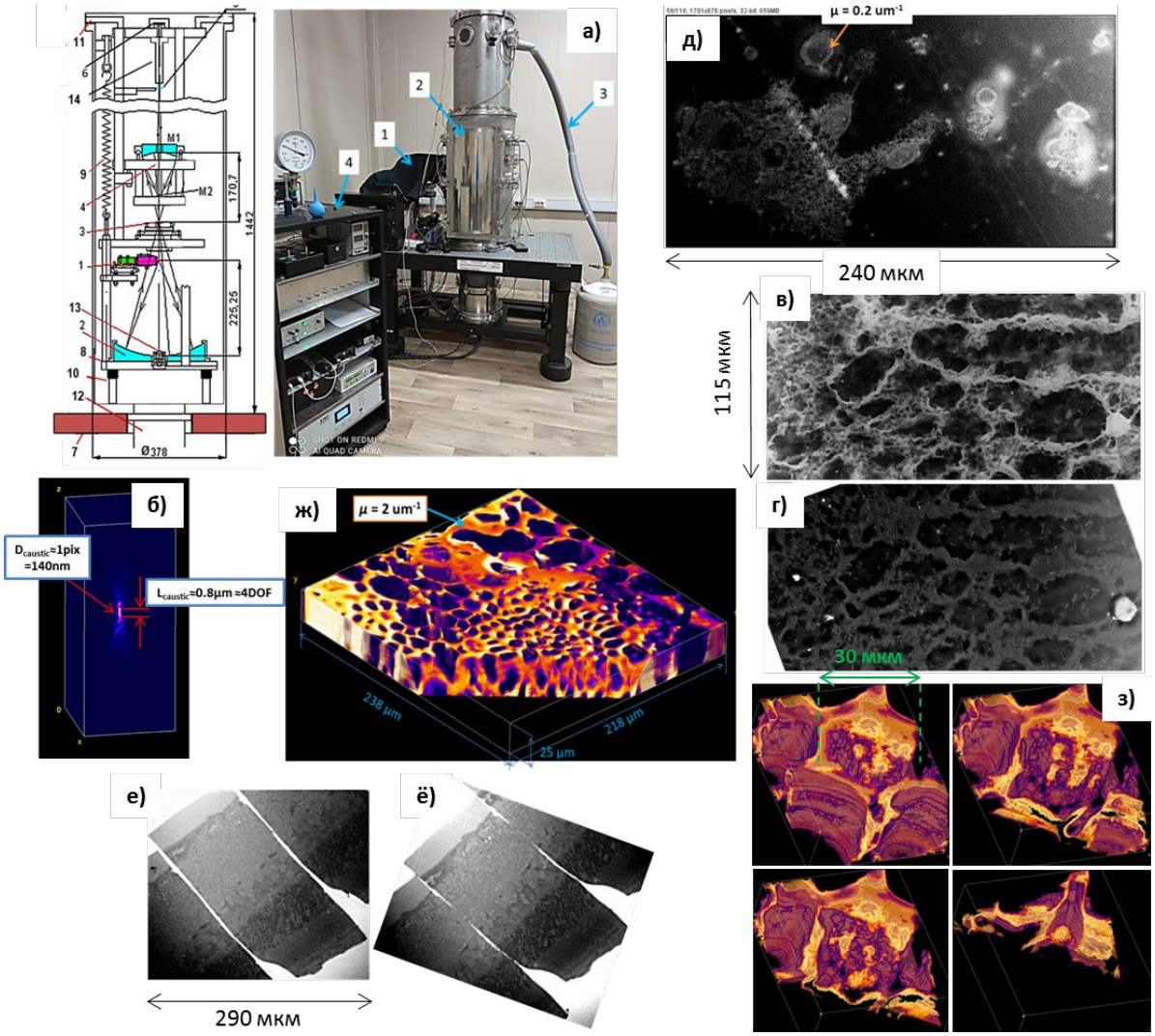


Рис. 2. МР-изображения (λ=13.84нм), полученные на зеркальном микроскопе 46 крат (а) с лабораторным лазерно-плазменным источником в ИФМ РАН и его измеренная ФРТ (б) [3,4]

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 22-62-00068.

Литература:

[1] Малышев, Чхало, Ракшун, Хомяков, Чернов // ПОВЕРХНОСТЬ, № 5, с. 3–15 (2023).
[2] Голышев, Казаков, Киреев, Реунов, Малышев // ACTA NATURAE, ТОМ 15 № 4 (59),стр. 32 (2023).
[3] Malyshev, I., D. Reunov, N. Chkhalo, // Optics Express. Vol. 30, № 26. - P. 47567-47586 (2022).
[4] И.В. Малышев, Д.Г. Реунов, Н.И. Чхало // Журнал технической физики, том 94 (8), с.1302 (2024).

УД-14

Биогибридный материал на основе молекул Dps клеток E.coli: опыт синхротронных и лабораторных исследований

Турищев С.Ю.[1], Беликов Е.А.[1], Паринова Е.В.[1], Чувенкова О.А.[1], Какулия Ю.С.[1], Чумаков Р.Г.[2], Лебедев А.М.[2], Пичкур Е.Б.[2], Требунских С.Ю.[1], Преображенская Е.В.[1], Сиваков В.[3], Антипов С.С.[1]
1 – Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
2 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
3 – Институт фотонных технологий, Йена, Германия
tsu@phys.vsu.ru

Востребованным направлением в современной науке, технике и технологиях является формирование, изучение и дальнейшее применение гибридных нанообъектов, сочетающих природные структуры и неорганические наноматериалы. Такие материалы могут стать дальнейшей основой в разработке и создании экономически выгодных и энергоэффективных устройств. Получаемые из бактерий кишечной палочки (E.coli, Escherichia coli) молекулы белка Dps (DNA-binded protein from starved cells) являются уникальным, по своим свойствам, наноразмерным объектом, включающим в себя органическую био-оболочку и внутреннюю полость, в которой формируется неорганическое ядро системы железо-кислород. Получение информации об источниках такого биогибридного материала – клетках бактерий E.coli и молекул белка Dps b оптимизация способа формирования биогибридного материала востребованы для дальнейшего применения на практике.

Комплексом методов рентгеновской и электронной спектроскопии и микроскопии, в том числе с использованием синхротронного излучения, были проведены исследования морфологии и физико-химического состояния клеток E.coli (BL21*(DE3), K12 MG1665), полученных из них молекул белка Dps, биогибридных структур на их основе. Установлены размеры и особенности морфологии биологических контейнеров – молекул белка бактериоферритина Dps, неорганических наночастиц, содержащих атомы железа в этих молекулах, клеток E.coli как источника молекулярной культуры. Показана специфика выделения молекулярной культуры белка бактериоферритина Dps клетками E.coli в состоянии суперпродукции белка, специфика совмещения молекулярной культуры с 3D-развитой поверхностью массивов нитевидного кремния с целью ее адресной функционализации. Продемонстрирована принципиальная применимость сверхвысоковакуумных методов XPS и XANES, для анализа состава, структуры и физико-химического состояния био- и гибридных материалов на основе молекул белка Dps и клеток E.coli. Впервые проведено исследование физико-химического состояния и состава био- и биогибридных материалов на основе молекул белка Dps и клеток E.coli методом фотоэлектронной спектроскопии XPS в комбинации с ионным удалением нанослоев. Показано наличие в наночастицах биогибридного материала атомов железа в различном зарядовом состоянии Fe3+ и Fe2+ и различной координации, а также возможность изменения состава наночастиц вплоть до восстановления железа.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-12-00413 и поддержано Министерством науки и высшего образования РФ в рамках соглашения N 075-15-2025-455 в части методических вопросов синхротронных исследований.

УД-15

Получение структуры белков и аптамеров с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния и теоретических методов

Томилин Ф.Н.[1,2], Щугорева И.А.[2,3], Рогова А.В.[2], Заблуда В.Н.[2], Кичкайло А.С.[2,3]

1 – Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

2 – Лаборатория цифрового управления лекарственными средствами и тераностики, Федеральный исследовательский центр КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

3 – Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого, Красноярск, Россия

felixnt@gmail.com

Представлены результаты построения трёхмерной атомной структуры молекул аптамеров в растворах при нормальных условиях с использованием методов малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) в сравнении с данными рентгеновской дифракции (РФА). Теоретическое моделирование, основанное на данных малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (SAXS), дало результаты, указывающие на то, что данный подход представляет собой перспективное направление для получения атомной структуры малых молекул, которая, в свою очередь, может быть использована при разработке новых аптамеров. Начальным этапом является моделирование вторичных структур на основе нуклеотидных последовательностей. Затем на основе вторичной структуры выполняется фактическое полноатомное моделирование трёхмерной структуры. Это даёт начальное представление об атомной структуре аптамера и его основных структурных компонентах в трёхмерном пространстве. После этого проводятся расчёты молекулярной динамики аптамера с использованием реалистичной физиологической среды. Это даёт информацию о конформационных изменениях аптамера в растворе с учётом растворителя, температуры и давления. Далее атомная структура, полученная на предыдущем этапе, уточняется путём проведения квантовохимических расчётов с использованием метода FMO. Затем анализируются парные взаимодействия с целью выяснения физических явлений, происходящих между аптамером и белком. После этого теоретические кривые рассеяния подвергаются сравнительному анализу с экспериментальными кривыми рассеяния малоуглового рассеяния. Этот этап представляет собой критический этап в процессе отбора, при котором сохраняются только те конформации аптамера, которые демонстрируют наименьшее отклонение от экспериментальных данных.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке проекта FWES-2022-0005 Министерства науки и образования Российской Федерации.

УД-16

Синхротронные методы в биомедицинских исследованиях

Кичкайло А.С.[1,2], Морячков Р.В.[1], Заблуда В.Н.[1], Федотовская В.Д.[1,2]
1 – ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН», Красноярск, Россия
2 – Красноярский государственный медицинский университет, Красноярск, Россия
annazamay@yandex.ru

Недавние достижения в области магнитно-резонансной томографии значительно улучшили диагностику опухолей мозга, особенно глиом. Однако протоколы со стандартными контрастирующими агентами не всегда отражают истинные границы опухоли, поскольку накопление контрастного вещества в зонах отека может быть неспецифическим, а при нарушенном кровообращении — недостаточным. Таким образом, существует острая необходимость в разработке современных неинвазивных стратегий визуализации и создания новых специфичных контрастных агентов для улучшения диагностики глиом.

Разработка эффективных препаратов, в том числе адресных и контрастирующих, требует знания пространственной структуры распознающих молекул и оценки их взаимодействия со своей мишенью. Для исследования эффективности препарата необходима оценка его взаимодействия с мембраной клетки-мишени и прохождения внутрь клетки. Для этого успешно используют искусственные липидные мембраны. Необходимо также изучение механизмов проникновения контрастирующих агентов сквозь мембрану клеток глиомы и через гемато-энцефалический барьер.

Синхротронные методы оказывают исключительную помощь при решении поставленным комплексных задач. В данной работе представлены несколько направлений и применяемых синхротронных методов, реализуемых на синхротроне КИСИ-Курчатов: малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР), метода Ленгмюр, а также рентгеновской микротомографии.

Для изучения структуры распознающих молекул и их олигомерных комплексов с успехом применяют метод МУРР. Такие исследования проводят в нативной среде, при изменяющихся внешних условиях, что необходимо для изучения зависимости конформации биомолекул от температуры, pH, давления, наличия различных ионов и др. Метод применим для молекулярных комплексов, анализа конформационных ансамблей, исследования многокомпонентных смесей, изучения конформации и динамики неупорядоченных белков и гибких молекул. Разрабатывается дизайн эксперимента для изучения распределения электронной плотности в монослойной липидной мембране в условиях полного внешнего отражения с одновременной регистрацией рентгеновского отражения и флуоресцентного сигнала, получаемого в результате неупругого рассеяния рентгеновского излучения в образце методами стоячих рентгеновских волн и рассеяния. На станции РТ-МТ синхротрона проведена томография срезов тканей и клеточных культур с контрастирующими агентами для восстановления картины распределения поглощающей плотности в образце.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 25-72-20052.

УД-17

Комплексный подход с применением МУРР в структурной биологии: некоторые результаты и перспективы

Штыкова Э.В.[1], Петухов М.В.[1,2], Батищев О.В.[1]

1 – Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
2 – Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва, Россия
pmxmvl@yandex.ru

Благодаря появлению мощных источников синхротронного излучения и новых типов регистрирующих устройств, малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) в настоящее время широко и успешно используется для структурной диагностики наноразмерных конденсированных фаз. Для структурной биологии главным преимуществом МУРР является возможность проведения исследований в естественной для образцов среде и отсутствие их специальной подготовки к измерениям [1]. Также важно, что метод обеспечивает статистически надежные данные, усредненные по всему объему образца, тем самым являясь идеальным дополнением к рентгеновской кристаллографии, электронной и атомно-силовой микроскопии, криоэлектронной микроскопии, ЯМР и т. д., которые предоставляют лишь локальную информацию. Кроме того, комплементарность МУРР к различным независимым структурным методам снижает неопределенность в интерпретации данных малоуглового рассеяния, возникающую из-за присущей МУРР неоднозначности решения обратных задач.

Работы, проведенные авторами данного доклада за последние двадцать лет, свидетельствуют о значимости и перспективности такого комплексного подхода в структурной биологии. Среди них можно упомянуть исследования с помощью МУРР структуры матриксных белков вируса гриппа [2-4] и вируса болезни Ньюкасла [5], а также роли структурных особенностей и посттрансляционных модификаций N-концевого фрагмента белков оболочки ряда растительных вирусов [6]. Помимо исследований в области вирусологии были проведены, например, такие пионерские работы как изучение полноразмерного белка, связывающего полипиримидиновый тракт (PTB) и его делеционных мутантов, состоящих из всех комбинаций доменов вдоль белковой последовательности [7], и исследование флаверубредоксина из *Escherichia coli*, обладающего дополнительным С-концевым модулем, состоящим из линкера и домена рубредоксина (Rd), необходимого для межбелковых окислительно-восстановительных процессов [8].

В процессе структурных исследований неизменно возникала потребность в разработках новых подходов к интерпретации данных МУРР, например, сочетающих 3D-реконструкцию малоуглового рассеяния и анализ состава смесей, применимых к полидисперсным и трудно очищаемым системам, включая слабо ассоциированные олигомеры и транзиентные комплексы, содержащие нуклеопротеины. Такая возможность 3D-моделирования рассеяния смесями значительно расширяет область применения малоуглового рассеяния и открывает новые возможности для анализа олигомерных смесей и процессов сборки/диссоциации белков и сложных белковых комплексов [9].

Примером комплиментарного использования вычислительных методов и МУРР может служить исследование белков HU бактериального нуклеоида и олигонуклеотидов ДНК [10]. В работе проводился скрининг моделей комплексов, построенных с помощью молекулярной динамики для нахождения структур, наилучшим образом согласующимися с данными МУРР.

Необходимость в разработке новых подходов к интерпретации данных МУРР особенно актуальна в настоящее время в связи с появлением продвинутых алгоритмов обработки большого массива данных, возникновения таких подходов, как *AlphaFold* — программы на базе искусственного интеллекта, разработанной Google DeepMind, – которая выполняет предсказания пространственной структуры белков, а также в связи с постоянным совершенствованием методов молекулярного моделирования и машинного обучения. Поэтому сейчас в наших исследованиях мы стремимся использовать все возникающие возможности для анализа структуры биологических объектов. Примером такого комплексного подхода может служить изучение полипротеина Gag, который является основным структурным белком вируса иммунодефицита человека. В жизненном цикле вируса он отвечает за сборку и высвобождение вирионов из клетки. Однако эти процессы пока изучены недостаточно и остается много вопросов, касающихся структуры и функции этого полипротеина в целом и составляющих его доменов в частности на разных стадиях созревания вириона. Используя новые комплексные подходы к интерпретации данных МУРР, мы стремимся описать структурные аспекты олигомеризации Gag в растворе в процессе формирования вируса. Фрагменты этих пока не опубликованных исследований будут представлены в докладе.

Мы надеемся, что приобретенный нами опыт многолетнего использования синхротронного излучения для структурного анализа наноразмерных биологических объектов с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния будет полезен сообществу пользователей «Сибирского Кольцевого Источника Фотонов» («СКИФ»).

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-44-10021 https://rscf.ru/project/23-44-10021/).

Литература:

[1] Svergun DI, Koch MH, Timmins PA, May RP (2013) Small Angle X-ray and Neutron Scattering from Solutions of Biological Macromolecules. Oxford University Press, London
[2] Shtykova E.V. et al.// PLoS One, 2013, e82431.
[3] Shtykova E.V. et al.// Scientific Reports, 2017, V 7, 16793.
[4] Kordyukova L.V. et al.// Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. 2019, V 37 (3), pp. 671-690.
[5] Shtykova E.V. et al.// Journal of Virology, 2019, 93(6).
[6] Shtykova E.V et al. // Viruses, 2024, *16*(3), p.427.
[7] Petoukhov M. V. et al. // Structure, 2006, 14, 1021-1027.
[8] Petoukhov M. V. et al. // Structure, 2008, 16, 1428-1436.
[9] Petoukhov M. V. et al. // Biochemistry, 2013, 52, 6844-6855.
[10] Petoukhov M. V. et al. // Crystallography Reports, 2024, 69(5), 674-681

УД-18

Возможности спектроскопии поглощения рентгеновского излучения для исследования состояния благородных и высокотехнологичных металлов в рудных минералах и гидротермальных флюидах

Тагиров Б.Р.[1], Тригуб А.Л.[2], Привалова К.А.[1], Чареева П.В.[1]
1 – Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН, Москва, Россия
2 – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
boris1t@yandex.ru

Одним из важных источников высокотехнологичных металлов являются сульфидные руды гидротермальных и магматических месторождений. Они могут содержать полезные компоненты как в виде собственных минералов, так и в виде примесей в основных рудных минералах - сульфидах Fe, Ni, Cu, Zn, Mo. В последнем случае форму нахождения называют «невидимой». Эту форму элементов-примесей сложно извлечь при переработке руды традиционными и экологически щадящими способами обогащения. Поэтому для эффективной разработки месторождений и совершенствования технологий извлечения полезных компонентов необходимы данные о формах нахождения «невидимых» примесей.

Многие высокотехнологичные металлы добываются на месторождениях гидротермального генезиса, которые образовались при высоких температурах при участии водных флюидов. Состояние металлов во флюидной фазе определяет механизмы их концентрирования. Эти данные позволяют прогнозировать состав руд и их качество.

Нами предложен метод, который позволяет выполнять эксперименты с *in situ* регистрацией рентгеновских спектров. Эксперименты проводятся при высоких температурах и давлениях, характерных для рудообразующих систем, с использованием капиллярной методики. Эта методика позволяет достичь давлений до нескольких килобар (4500 бар при температуре до 700 °C) и частично перекрыть область применения гидротермальных алмазных наковален (HDAC). По сравнению с HDAC капиллярный метод намного проще и дешевле, система химически инертна, а качество спектров (XANES+EXAFS) выше. Полученные данные позволили охарактеризовать поведение Au, Pt, Zr, Hf в широком диапазоне физико-химических параметров и составов флюидов – от разбавленных растворов до сухих хлоридных расплавов, и выявить общие фундаментальные закономерности поведения компонентов флюида в зависимости от параметров состояния и состава системы.

Путём комбинации эксперимента на источниках синхротронного излучения и квантовохимических расчётов установлены формы нахождения экономически значимых примесных компонентов рудообразующих сульфидов. С использованием метода HERFD XAS (рис. 1) определено состояние Au и As в минералах системы Fe-As-S (пирите FeS_2, арсенопирите FeAsS, лёллингите $FeAs_2$). Установлены закономерности изменения формы нахождения рассеянного «невидимого» золота в зависимости от химического состава важнейшего рудного минерала – пирита. Экспериментально, методом рентгеновской спектроскопии поглощения, обосновано осаждение золота пиритом в виде твёрдого раствора замещения. Обнаружены новые формы «невидимого» золота – кластеры Au_2S и

лёллингитоподобные атомные кластеры, которые определяют золотоносность пирита при высоких концентрациях As.

Установлены формы вхождения «невидимого» золота в минералы и фазы системы Cu-Fe-S – ковеллин Cu_2S (твёрдый раствор), борнитовый и промежуточный твёрдые растворы (атомные кластеры CuAuS). Охарактеризована зависимость поведения Au в минералах этой системы (растворимость, формы нахождения) от температуры и летучести серы. Установлены особенности электронного строения соединений.

Для сфалеритового твёрдого раствора определены параметры локального атомного окружения и закономерности их изменения в зависимости от состава и физико-химических параметров для In, Au, Ag, Cu и Cd. Установлено, что для элементов подгруппы меди изоморфный твёрдый раствор образуется по механизму компенсации заряда $2\ Zn^{2+} = Me^{+}(Au^{+},Ag^{+},Cu^{+}) + Me^{3+}\ (In^{3+},Fe^{3+})$. При этом содержание металлов подгруппы меди в сфалерите связано с содержанием сопряжённой примеси.

Изучение уникальных образцов молибденита MoS_2 фумарол вулкана Кудрявый (о. Итуруп, Курильские о-ва) методами XANES + EXAFS позволило установить форму вхождения Re в этот минерал. Согласно анализу спектров EXAFS, Re замещает Mo в катионной подрешетке молибденита. Полученные данные указывают на то, что изученные образцы молибденита состоят из комбинации упорядоченных и неупорядоченных 2H и 3R политипов, а примеси (включая Re) концентрируются в неупорядоченных доменах.

Дальнейший прогресс исследования представляется в применении метода HERFD XAS с использованием микропучка для исследования отдельных зон минералов, контрастных по химическому составу, в комбинации с данными XES.

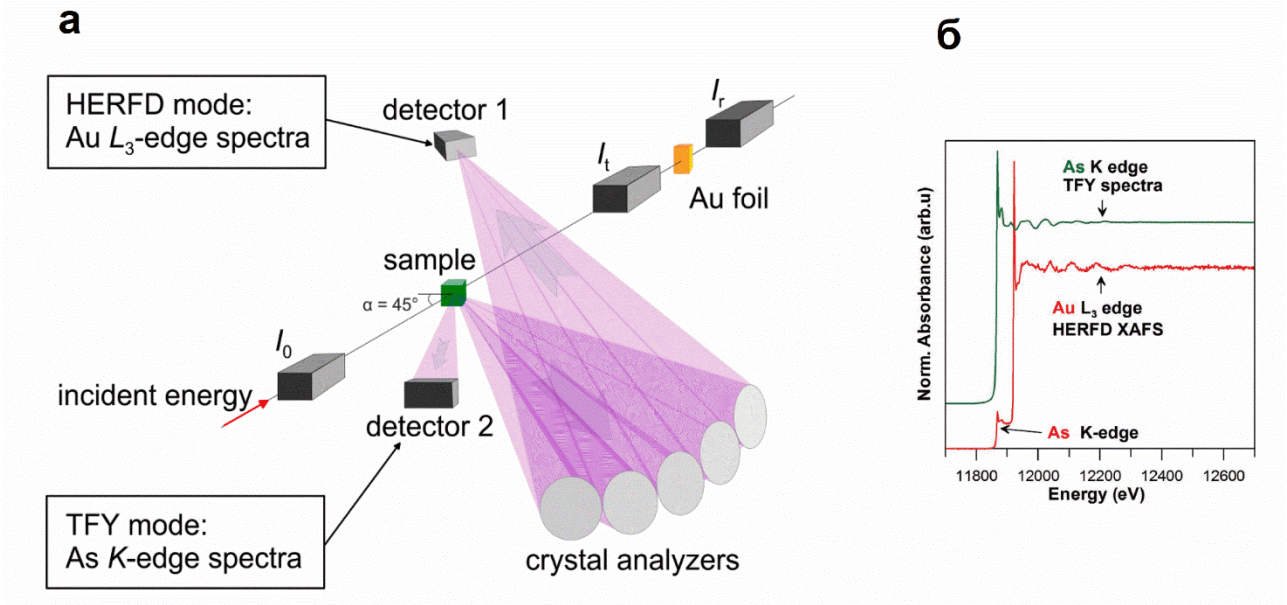


Рис. 1. Схема эксперимента на станциях ID26 и BM16-FAME-UHD (ESRF). Спектры регистрируются одновременно для Au (HERFD-XAS) и As (TFY-XAS); (б) спектры Au и As в лёллингите $FeAs_2$, содержащем 800 ppm Au в твёрдом растворе Au→Fe.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-17-00090.

УД-19

Синхротронные спектроскопические исследования *in operando* прототипов перспективных устройств наноэлектроники и спинтроники

Зенкевич А.В.
Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
zenkevich.av@mipt.ru

В докладе будет рассмотрена разработанная на протяжении последних 10 лет методология и обзор результатов исследований *in operando* спектроскопическими методами (HAXPES, MCDAD, XMCD, мёссбауэровская спектроскопия) на различных синхротронных источниках взаимосвязи между физическими и функциональными свойствами многослойных структур в прототипах перспективных устройств микроэлектроники и спинтроники, в том числе, устройств резистивной [1] и сегнетоэлектрической (СЭ) [2-4,8] энергонезависимой памяти на основе $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ (HZO), а также композитных мультиферроиков на основе бислойных структур ферромагнетик (ФМ)/СЭ (ФМ=Ni, ^{57}Fe, EuS, СЭ=$Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$) [5-7].

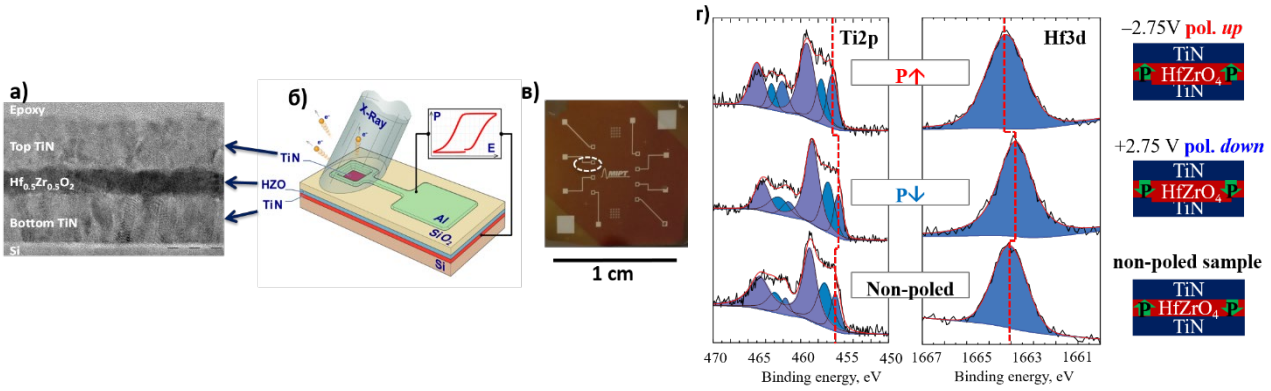


Рис. 1. а) Поперечное сечение прототипа ячейки памяти на основе структуры TiN/СЭ-HZO/TiN; б) общая схема эксперимента при использовании метода HAXPES; в) Чип с устройствами СЭ памяти, приготовленный для operando экспериментов; г) спектры Hf3d и Ti2p, снятые после in situ переключения СЭ поляризации вверх/вниз в конденсаторе [2].

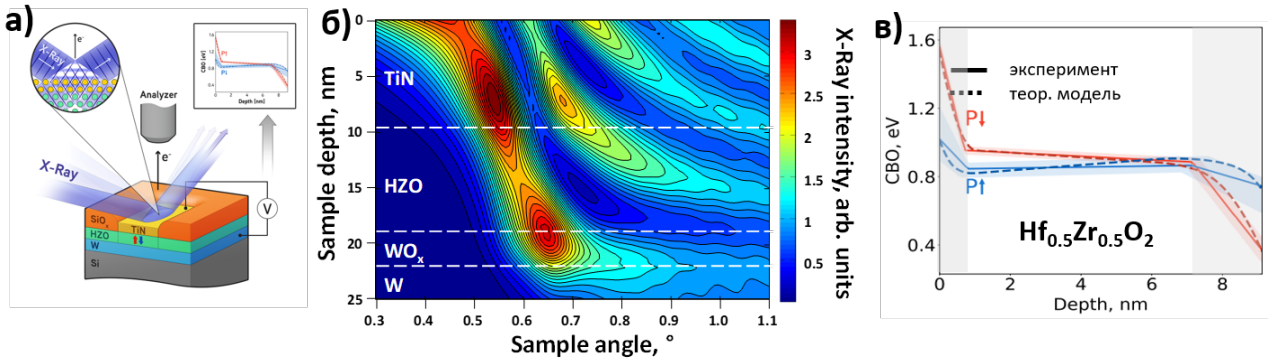


Рис. 2. а) Общая схема operando эксперимента по восстановлению распределения потенциала в слое СЭ-HZO прототипа устройства энергонезависимой памяти на основе TiN/HZO/TiN при различных направлениях поляризации методом HAXPES в режиме «стоячих рентгеновских волн»; б) моделирование распределения интенсивности рентгеновского излучения по глубине структуры TiN/HZO/TiN от угла падения; в) восстановленное распределение потенциала по глубине слоя СЭ-HZO для противоположных направлений СЭ поляризации [4].

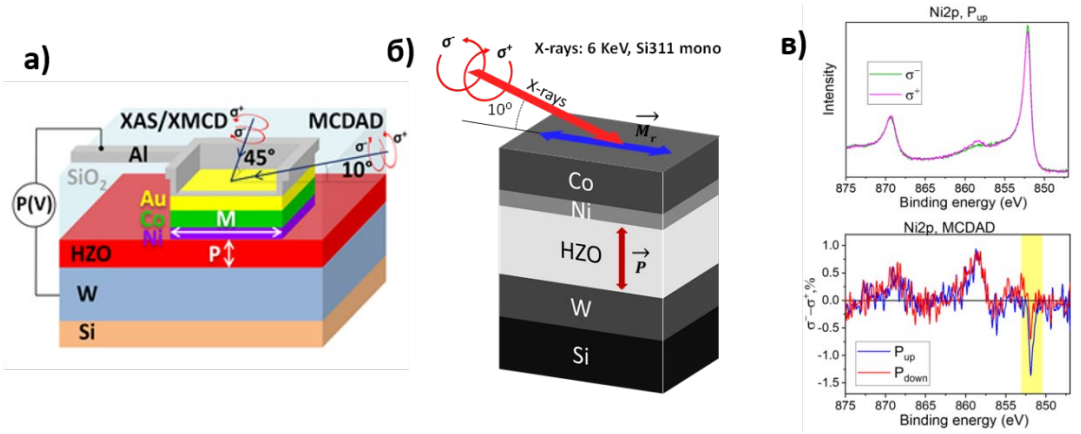


Рис. 3. а) Общая схема operando эксперимента по поиску магнитоэлектрического взаимодействия на границе раздела ФМ/СЭ в бислойном композитном мультиферроике на основе Co/Ni/HZO методами XMCD и MCDAD (magnetic circular dichroism in angular distribution); б) схема проведения измерений при использовании метода MCDAD in operando; в) спектры Ni2p для различных направлений рентгеновской круговой поляризации и дифференциальные спектры для противоположных направлений поляризации СЭ-HZO [6].

Благодарности: Доклад подготовлен при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках реализации программы создания и развития научного центра мирового уровня «Центр перспективной микроэлектроники» по соглашению о предоставлении гранта № 075-15-2025-608.

Литература:

[1] Matveyev Yu. и др. Effect of biasing at elevated temperature on the electronic structure of Pt/HfO2/Si stacks // Microelectronic Engineering. 2011. Т. 88. – № 7. С. 1353–1356.
[2] Matveyev Yu. и др. Effect of Polarization Reversal in Ferroelectric TiN/Hf $_{0.5}$ Zr $_{0.5}$ O $_2$ /TiN Devices on Electronic Conditions at Interfaces Studied in Operando by Hard X-ray Photoemission Spectroscopy // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2017. Т. 9. – № 49. С. 43370–43376.
[3] Mikheev V. и др. Ferroelectric Second-Order Memristor // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2019. Т. 11. – № 35. С. 32108–32114.
[4] Matveyev Yu. и др. Polarization-dependent electric potential distribution across nanoscale ferroelectric $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ in functional memory capacitors // Nanoscale. 2019. Т. 11. – № 42. С. 19814–19822.
[5] Khanas A. и др. EuS/$Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ Bilayers as a Prospective Multiferroic System // Adv. Materials Inter. 2020. Т. 7. – № 14. С. 2000411.
[6] Dmitriyeva A. и др. Magnetoelectric Coupling at the Ni/$Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ Interface // ACS Nano. 2021. Т. 15. – № 9. С. 14891–14902.
[7] Mikheev V. и др. Search for Magnetoelectric Coupling at the ^{57}Fe/$Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ Interface Using Operando Synchrotron Mössbauer Spectroscopy // Adv. Materials Inter. 2022. Т. 9. – № 36. С. 2201341.
[8] Chouprik, A. и др. Effect of Domain Structure and Dielectric Interlayer on Switching Speed of Ferroelectric $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ Film // Nanomaterials. 2023. Т. 13. С. 3063.

УД-20

Исследование электронного состояния MoS_2 в натрий-ионном аккумуляторе методами рентгеновской спектроскопии in situ и operando

Булушева Л.Г.[1], Загузина А.А.[1], Федоренко А.Д.[1], Семушкина Г.И.[1], Николенко А.Д.[2], Окотруб А.В.[1]

1 – Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия

bul@niic.nsc.ru

Тонкие слои дисульфида молибдена MoS_2 были синтезированы на поверхности графена в результате быстрого термолиза смеси тиомолибдата аммония и оксида графена. Наноматериал MoS_2/rGO использовался в качестве рабочего электрода в натрий-ионном аккумуляторе для изучения его электронной структуры при взаимодействии с ионами Na^+. Для регистрации рентгеновских спектров поглощения (XANES) и эмиссии (РЭС) была разработана специальная электрохимическая ячейка с прозрачным, проводящим и прочным окном [1]. Основу ячейки составили части коммерческой батарейки копеечного типа CR2032, в крышке которой вырезалось отверстие и закрывалось пленкой Майлара. XANES спектры измеряли вблизи краев S K и Mo L_3 на канале ВЭПП-4 станции синхротронного излучения «Космос». Регистрацию РЭС S $K\alpha_{1,2}$ и Mo $L\alpha_{1,2}$ спектров проводили с использованием лабораторного высоковакуумного прибора «Стеарат». Анализ спектров выявил частичное окисление серы и молибдена даже в свежесобранной ячейке из-за контакта MoS_2 с продуктами реакции металлического натрия и электролита $NaClO_4$/EC/DMC. Измерения Operando XANES и in situ РЭС ячейки выявили значительное снижение плотности незанятых состояний S 3p и Mo 4d и их сдвиг в сторону более низких энергий, что было связано с переносом электронной плотности от интеркалированного натрия. Исследование разряженного электрода методом РФЭС показало образование поверхностного слоя SEI и преобразование большинства гексагональных слоев MoS_2 в тетрагональные слои. Слои MoS_2, сохраняющие свою исходную структуру, скорее всего, находятся в непосредственном контакте с поверхностью rGO, что предотвращает их трансформацию даже при полном разряде электрода. Таким образом, правильное сочетание наноструктурированного MoS_2 с графеноподобным компонентом может обеспечить стабильную работу гибридного электродного материала в натрий-ионных аккумуляторах.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-73-00048.

Литература:

[1] Bulusheva L.G., Zaguzina A.A., Fedorenko A.D., Semushkina G.I., Gusel'nikov A.V., Shubin Y.V., Nikolenko A.D., Okotrub A.V. // Phys. Status Solidi B. 2025. V.262. P. 2400272.

УД-21

Исследование твердых растворов $Bi_{1-y}Sm_yFe_{1-x}Ti_xO_3$ методами дифракции нейтронов и синхротронного излучения

Карпинский Д.В.[1,2], Латушко С.И.[1,2], Желудкевич Д.В.[1,2], Силибин М.В.[2], Гилеп А.А.[3]

1 – Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь

2 – Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», Зеленоград, Москва, Россия

3 – Институт биоорганической химии НАН Беларуси, Минск, Беларусь

karpinsky@physics.by

Известно, что замещение ионов висмута и железа в исходном феррите висмута редкоземельными ионами и ионами переходных металлов в соответствующих позициях структуры перовскита позволяет существенно изменять структурное состояние твердых растворов на основе $BiFeO_3$ и управлять их физико-химическими параметрами и свойствами. В данной работе рассмотрена эволюция кристаллической и магнитной структуры твердых растворов $Bi_{0.88}Sm_{0.12}Fe_{1-x}Ti_xO_3$ ($0 \le x \le 0,1$), которые характеризуются сосуществованием ромбоэдрической и орторомбической фаз.

Твердые растворы с химической формулой $Bi_{0.88}Sm_{0.12}Fe_{1-x}Ti_xO_3$ ($0 \le x \le 0,1$) были получены методом твердофазных реакций с использованием двухступенчатой технологии. Фазовый анализ проводили с помощью рентгеновской порошковой дифракции на дифрактометре Adani POWDIX 600 с Cu Kα-излучением, а также источнике синхротронного излучения SPring-8 на инструменте BL02B2 (λ = 0.42019 Å). Нейтронограммы были получены на инструменте KMC-2 источника нейтронов BESSY II.

Диапазон концентраций, характерный для однофазного антиполярного орторомбического состояния в твердых растворах $Bi_{1-y}Sm_yFeO_3$ соответствует области $0,12 < y < 0,14$. Ромбоэдрическая (пространственная группа *R3c*, $\sqrt{2}a_p*\sqrt{2}a_p*2\sqrt{3}a_p$, a_p – параметр примитивной ячейки перовскита) и антиполярная орторомбическая (пр. гр. *Pnma*, $\sqrt{2}a_p*2a_p*\sqrt{2}a_p$) фазы сосуществуют в диапазоне концентраций $0,10 < y \le 0,12$. Химическое замещение ионов Fe ионами Ti в указанных твердых растворах приводит к стабилизации ромбоэдрической фазы. На рисунке 1 представлена уточненная дифрактограмма твердого раствора $Bi_{0,88}Sm_{0,12}FeO_3$, полученная с использованием синхротронного излучения. Составы $Bi_{0,9}Sm_{0,1}Fe_{1-x}Ti_xO_3$ являются однофазными с ромбоэдрической структурой (пр.гр. *R3c*) в исследованном диапазоне концентраций $0 \le x \le 0,10$, тогда как твердые растворы $Bi_{0,88}Sm_{0,12}Fe_{1-x}Ti_xO_3$ обладают смешанным структурным состоянием с преобладанием ромбоэдрической фазы и незначительным количеством антиполярной орторомбической фазы (пр. гр. *Pbam*). Объемная доля орторомбической фазы постепенно уменьшается от ~50 % в составе $Bi_{0,88}Sm_{0,12}FeO_3$ до ~10 % в $Bi_{0,88}Sm_{0,12}Fe_{0,94}Ti_{0,06}O_3$, в твердых растворах с большим содержанием ионов Ti орторомбическая фаза не обнаруживается с помощью обычных рентгеновских дифракционных измерений, а также экспериментов по синхротронной дифракции.

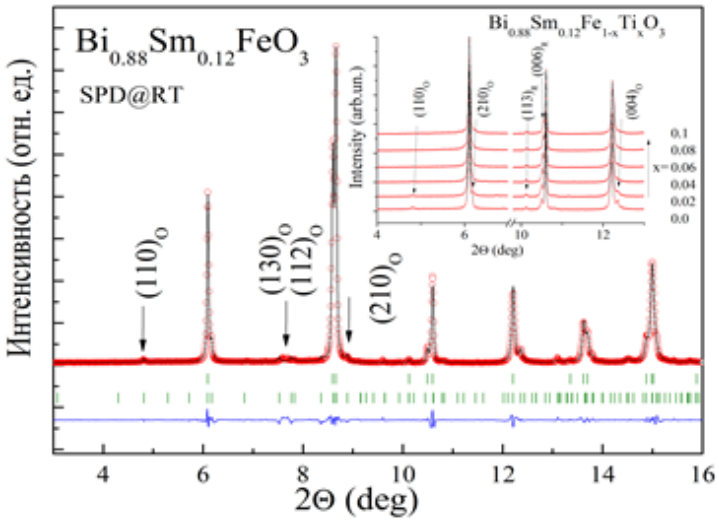


Рисунок 1. Дифрактограмма состава $Bi_{0,88}Sm_{0,12}FeO_3$, уточненная с использованием двухфазной модели (верхний ряд меток обозначает фазу R3c (R), второй ряд меток – фазу Pbam (O)). На вставке показаны концентрационные изменения рефлексов, характерных для ромбоэдрической и антиполярной орторомбической фаз соединений $Bi_{0,88}Sm_{0,12}Fe_{1-x}Ti_xO_3$.

Анализ дифракционных данных полученных с использованием синхротронного излучения, а также дифракции нейтронов (Рисунок 2) свидетельствует о том, что замещение ионов железа, находящихся в B- позиции структуры перовскита ионами титана приводит к стабилизации ромбоэдрической фазы. Объемная доля орторомбической фазы постепенно уменьшается от ~50 % в составе $Bi_{0,88}Sm_{0,12}FeO_3$ до ~20 % в составе $Bi_{0,88}Sm_{0,12}Fe_{0,94}Ti_{0,06}O_3$, в твердых растворах с большим содержанием Ti объемная доля орторомбической фазы сохраняется приблизительно на одинаковом уровне.

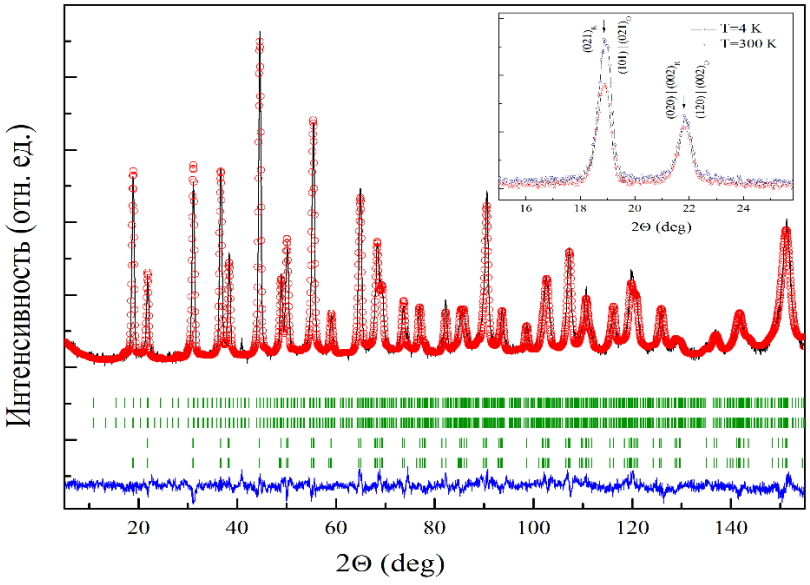


Рисунок 2. Нейтронограмма состава $Bi_{0.88}Sm_{0.12}Fe_{0.94}Ti_{0.06}O_3$, полученная при температуре T = 4 K и уточненная с использованием двухфазной модели (верхние ряды меток обозначают структурные фазы R3c и Pbam, нижние – соответствующие магнитные фазы). Рисунок на вставке показывает температурное изменение рефлексов, имеющих значительный магнитный вклад.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (23-19-00347). Исследования магнитной структуры выполнены при поддержке БРФФИ (Ф24В-004).

УД-22

Перспективность использования СИ в создании новых функциональных материалов

Шевченко В.Г.[1], Еселевич Д.А.[1], Конюкова А.В.[1], Винокуров З.С.[2], Толочко Б.П.[3,4]
1 – Институт Химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
2 – ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН, Наукоград Кольцово, Россия
3 – Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия
4 – Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
shevchenko@ihim.uran.ru

Синхротронное излучение (СИ) находит все более широкое применение в решении создания новых функциональных материалов для развития перспективных направлений науки и техники. Накопленный опыт работы центра коллективного пользования (ЦКП) Сибирского центра синхротронного и терагерцевого излучения (СЦ СТИ) на базе накопителей ИЯФ СО РАН им. Г.И. Будкера, позволил подготовить к реализации проект поколения «4+» «СКИФ». В нем предполагается использование не только созданных ранее исследовательских станций, но и дополнительных, с учетом, возникающих потребностей.

Более десяти лет, в рамках договоров о совместной работе с ИХТТ и механохимии СО РАН, ИЯФ СО РАН им. Г.И. Будкера, проводились исследования влияния модификаторов различной природы на реакционную активность металлических горючих, на основе алюминия и бора. Результаты этих исследований позволили выяснить динамику процессов фазообразования и их влияние на полноту и скорость взаимодействия металлических порошков непосредственно в ходе окисления в программируемых режимах нагрева.

Полученные данные положены в основы осознанного поиска более эффективных энергетических, композиционных и каталитических материалов. Представляет интерес расширить возможности использования СИ непосредственно в быстро протекающих процессах горения и взрыва реальных или модельных составов энергетических конденсированных систем (ЭКС). Это позволит сократить время поиска новых высокоэффективных энергетических материалов.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием Института химии твердого тела УрО РАН № 124020600007-8.

УД-23

Разработка станции для метрологического обеспечения контроля качества изделий и аттестации технологических процессов аддитивных производств

Алтынбаев Е.В.[1,2], Гоголинский К.В.[1,2], Моисеев Н.Н.[3]
1 – Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
2 – НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия
3 – ВНИИМ им. Д. И. Менделеева, Санкт-Петербург, Россия
e.altynbaev@spbu.ru

Методы неразрушающего контроля (НК) с использованием ионизирующего излучения, в первую очередь, синхротронного, позволяют получать уникальную информацию о микро- и макроструктуре изделий, их элементном составе и параметрах напряженно-деформированного состояния.

Технологии аддитивного производства (АП) имеют кардинальное преимущество по сравнению с традиционными технологиями металлообработки при создании изделий сложной формы, в т.ч. крупногабаритных. Однако, особенности технологий АП требуют обеспечения контроля внутренней структуры изделия как непосредственно в процессе изготовления (в режиме operando), так и в рамках отработки технологии производства, поскольку последовательное «выращивание» детали приводит к риску формирования неоднородностей внутри изделия. Выявление таких дефектов при постоперационном контроле выполняется, как правило, разрушающими методами и не позволяет своевременно остановить либо скорректировать технологический процесс, что приводит к существенным временным и финансовым потерям. Создание исследовательской инфраструктуры на базе ЦКП «СКИФ» позволит обеспечить контроль технологии аддитивной лазерной печати непосредственно в режиме operando методами радиографии ионизирующего излучения, а также контролировать остаточные напряжения конечного изделия методами сресс-дифрактометрии и будет применяться для отработки технологических процессов АП и контроля качества ответственных изделий, что даст уникальную возможность для их полноценного внедрения.

В настоящее время широкому внедрению аддитивных технологий в высокотехнологичных отраслях промышленности препятствует отсутствие нормативной базы, регламентирующей требования к технологическим процессам АП, материалам и конечным изделиям. Для разработки требуемых нормативных документов, включая технические условия, а также отраслевые и государственные стандарты, необходимы аттестованные должным образом средства испытаний и контроля, обеспечивающие подтверждение соответствия тех. процессов, материалов и изделий АП предъявляемым требованиям. Для решения этой задачи необходимо создать систему метрологического обеспечения применяемого контрольного и измерительного оборудования. В настоящее время для неразрушающего контроля (НК) изделий АП применяются акустические (ультразвуковой и акустоэмиссионный) и рентгеновские методы контроля, при этом акустоэмиссионный используется при технологическом контроле в процессе производства, ультразвуковой и

рентгеновский – для контроля готовых изделий. Основной проблемой традиционных методов НК является то, что с из помощью получают только косвенную информацию о наличии неоднородности (поры, включения, трещины), при этом отсутствует возможность верификации полученных данных без разрушения образца. Решить эту проблему можно с использованием томографии методами синхротронного излучения, а также комплементарного использования нейтронных методов, в качестве референтной методики контроля, обеспечивающей необходимую глубину диагностирования и высокое пространственное разрешение. Предполагаемая в работе метрологическая аттестация (калибровка и дальнейшие испытания в целях утверждения типа средства измерения) томографических станций позволит использовать этот метод НК для контроля готовых изделий реального производства. Кроме того, станцию предполагается аттестовать как эталон для дальнейшей метрологической аттестации мер (стандартных образцов) для калибровки и настройки традиционных средств НК.

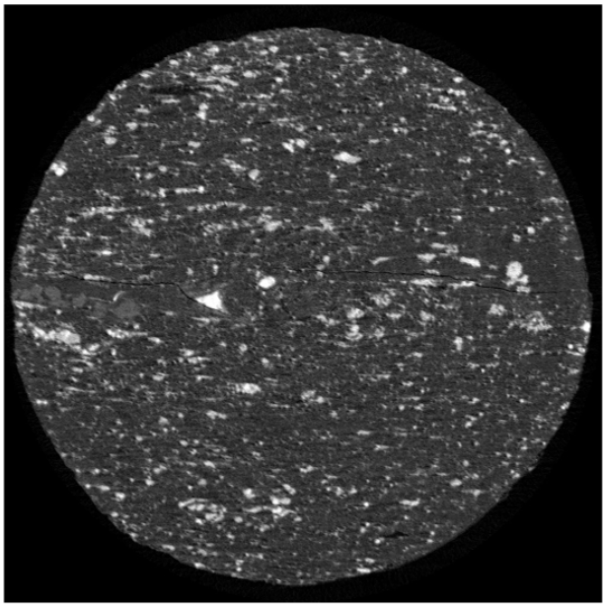
Для решения этих задач планируется разработать концептуальный проект станции синхротронного излучения, обеспечивающей совмещение возможностей синхротронной томографии и радиографии, синхротронной стресс-дифрактометрии, а также рентген-флюоресцентного анализа материалов для контроля химического состава конечного изделия, что, в совокупности, позволит приступить к решению проблем по метрологическому обеспечению технологий АП и их широкому внедрению в реальные производственные процессы.

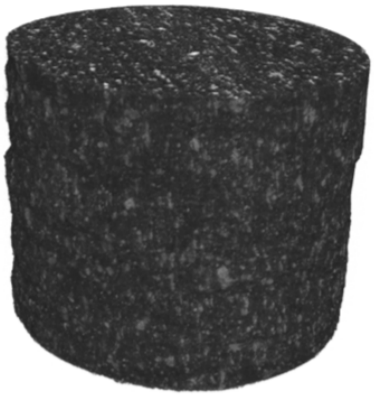
УД-24

Технологии синхротронного излучения для развития нефтяной отрасли ХМАО-Югры

Евсеев Ф.А., Иванов И.А.
АУ «НАЦ РН им. В.И. Шпильмана», Ханты-Мансийск, Россия
fedor_evseev@rambler.ru

Переход ресурсной базы углеводородов к всё более сложным по структуре коллекторам стимулирует нефтегазовые компании к поиску и внедрению инновационных технологий для их эффективной разработки. В качестве таких технологий все большую популярность приобретают цифровые решения, ориентированные на высокопроизводительные вычислительные системы. С помощью сравнительно новой для нефтяной отрасли технологии синхротронного излучения (СИ) появилась возможность неинвазивно реконструировать внутреннюю структуру керна в динамическом режиме с последующим моделированием физико-химических и механических процессов, адаптированные к пластовым условиям, в специально сконструированных измерительных ячейках [1, 2]. Кроме того, технология СИ поколения 4+ представляет особый интерес при изучении пород-коллекторов, характеризующиеся низкой проницаемостью с преобладанием субмикронной пористости: современные лабораторные томографы имеют ограничение по пространственному разрешению, что не позволяет качественно описать структуру со сложным топологическим и минеральным скелетом, например, структуру баженовской свиты (рис.1). Также, ограниченная мощность приборов не позволяет визуализировать структуру низкопроницаемых пород-коллекторов стандартных размеров, с пространственным разрешением, достаточным для построения их детальной модели порового пространства [3].





Диаметр цилиндра, (мм)	2,35
Разрешение, (мкм/пиксель)	0,75
Закрытая пористость, (%)	1,065
Общая пористость, (%)	1,066

Рис. 1. Томограмма образца породы баженовской свиты, полученная на рентгеновском микротомографе SkyScan 2214

Между тем, согласно концепции развития ресурсной базы углеводородного сырья ХМАО-Югры до 2050 года [4], объем добычи нефти в регионе в 2024 году составил 205 млн тонн, и более 26% сырья, добываемого на территории округа, приходится на трудноизвлекаемые

запасы (ТрИЗ): за последние 5 лет доля ТрИЗ увеличилась с 22,0% до 26,5% (рис.2). Иными словами, более четверти общего объёма извлекаемых запасов приходится на трудноизвлекаемую нефть. Ожидается, что с каждым годом доля ТРиЗ будет только расти, поэтому энергетические компании вынуждены делать упор на поиск и развитие технологий повышения эффективности выработки сложных месторождений.

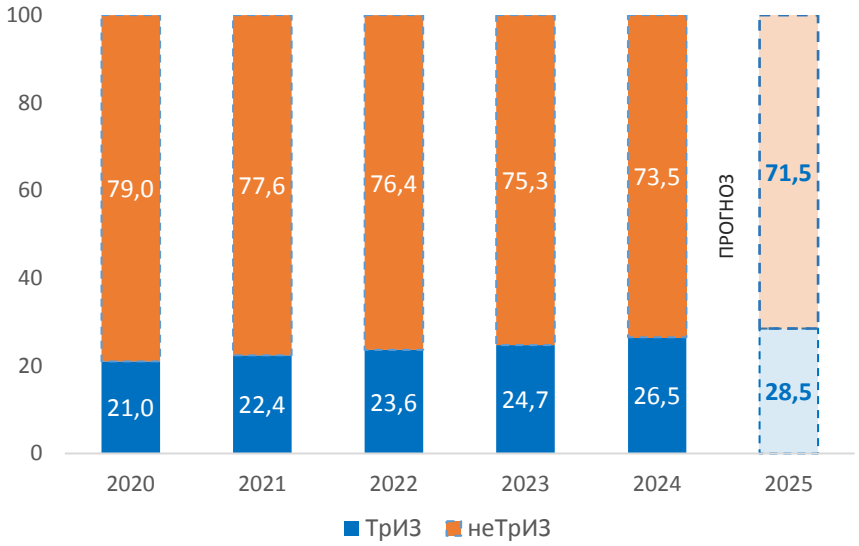


Рис. 2. Динамика текущих извлекаемых запасов нефти на территории ХМАО-Югры

Ко всем вышеописанным ограничениям следует также отнести отсутствие единых методических стандартов и рекомендаций по проведению сканирования керна методами томографии, хранению, обработки и передачи цифровых данных, отсутствие метрологической меры для калибровки и поверки томографов.

Технологии синхротронного излучения открывают новые возможности для преодоления существующих границ промышленной томографии и могут стать важным инструментом в решении актуальных задач нефтяной отрасли ХМАО-Югры.

Литература:

[1] Drobchik A.N., Nikitin V.V., Fokin M.I. and others // Environmental Cell for in situ X-ray Synchrotron Micro-CT Imaging with Simultaneous Acoustic Measurements. Journal of Synchrotron Radiation. 2022. V.29. N2. P. 515-521. DOI: 10.1107/s1600577521013308.

[2] Butler I., Fusseis F., Cartwright-Taylor A., Flynn M. // Mjölnir: a miniature triaxial rock deformation apparatus for 4D synchrotron X-raymicrotomography. Journal of Synchrotron Radiation. 2020. V.27. P. 1681-1687. DOI: 10.1107/S160057752001173X.

[3] Yazynina I.V., Shelyago E.V., Abrosimov A.A. and others // Testing a new approach to petrophysical trend determination from X-Ray tomography. Oil Industry Journal. 2017. P. 36-40. DOI: 10.24887/0028-2448-2017-2-36-40.

[4] О концепции развития ресурсной базы углеводородного сырья Ханты-Мансийского автономного округа – Югры от 25 августа 2025 года № 391-рп: Распоряжение Правительства Ханты-Мансийского автономного округа – Югры // Департаментом недропользования и природных ресурсов ХМАО-Югры: офиц. сайт. URL: https://depprirod.admhmao.ru/upload/iblock/e1a/e0y0ksb5y0zw71s7728o6mdeblhuvlok/391_rp.pdf (дата обращения: 26.08.2025)

УД-25

Плазменно-ассистированное напыление высокоэнтропийного биосовместимого покрытия и исследование его структуры с использованием синхротронного излучения

Прокопенко Н.А.[1], Петрикова Е.А.[1], Иванов Ю.Ф.[1], Коваль Н.Н.[1], Шмаков А.Н.[2], Толкачёв О.С.[1]
1 – Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия
2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
koval@hcei.tsc.ru

Использование синхротронного излучения для исследования структурно-фазового состояния тонких (несколько микрометров) покрытий в процессе их формирования при вакуумно-дуговом плазменно-ассистированнном напылении позволяет значительно сократить время подбора оптимальных параметров технологического процесса, что весьма важно для разработки новых функциональных слоёв и покрытий.

Настоящая работа посвящена исследованию *in situ* с использованием СИ формирования многоэлементного высокоэнтропийного покрытий системы Ti-Nb-Zr-Ta-Hf-Cu, в которое входят биосовместимые элементы, а также медь, обладающая свойствами антибактериальной активности [1]. Высокоэнтропийный сплав (ВЭС) состава TiNbZrTaHf, использовавшийся в качестве катода дугового испарителя, сочетает высокие значения прочности и пластичности [2], а также обладает высокой коррозионной стойкостью [3], что и являлось предпосылкой для формирования биомедицинских покрытий.

Эксперименты проводились на установке ВЭИПС-1 [4], разработанной в ИСЭ СО РАН и установленной на третьем канале синхротрона ВЭПП-3 в ИЯФ СО РАН.

На рис.1 приведены характерные рентгенограммы, полученные *in-situ* во время напыления высокоэнтропийного покрытия с током дугового испарителя $I_{ВЭС}$=80 А и одновременной работе испарителя с медным катодом при токе I_{Cu}=80 А.

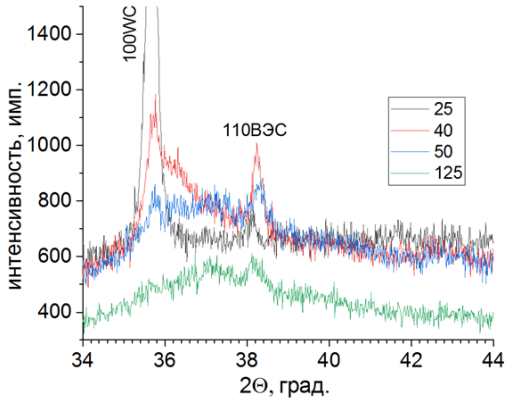


Рис.1. Фрагменты рентгенограмм, полученных на различных стадиях напыления пленки; числами указана длительность процесса формирования пленки в минутах.

Выявлено формирование аморфно-кристаллического состояния, основной фазой которого является ВЭС состава, соответствующего использованному катоду с включениями атомов меди в аморфной плёнке. В зависимости от тока I_{Cu} от ≈10% при токе I_{Cu}=55 А до ≈25% при токе I_{Cu}=80 А.

Специально проведённые исследования с использованием просвечивающей электронной микроскопии показали, что плёнка ВЭС без атомов меди (I_{Cu}=0 А) имеет столбчатую структуру, а при добавках меди она становится аморфно-кристаллической, в которой кристаллическая фаза расположена в аморфной структуре.

Экспериментально показано, что изменяя содержание меди в покрытии путём варьирования током дугового испарителя с медным катодом можно управлять структурой и, соответственно, свойствами формируемого покрытия на основе ВЭС.

Благодарности: Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (Грант № 24-69-00074).

Литература:

[1] Slobodyan M., Pesterev E., Markov A.// Materials Today Communications, 2023, vol. 36, Art.106422, p. 82.
[2] Coury F.G., Kaufman M., Clarke A.J. // Acta Mater 2019, Vol. 175, p.66.
[3] Jayaraj J., Thinaharan C., Ningshen S., Mallika C., Mudali U.K. // Intermetallics, 2017, Vol. 89, p.123.
[4] Денисов В.В., Коваль Н.Н., Ратахин Н.А. [и др.] // Патент № 2833300 С1, 2023.

УД-26

Применение метода дифракции синхротронного излучения для исследования устойчивости состава аморфно-кристаллических порошковых материалов в условиях контролируемого отжига

Собачкин А.В.[1], Логинова М.В.[1], Ситников А.А.[1], Яковлев В.И.[1], Филимонов В.Ю.[1,2], Мясников А.Ю.[1,3], Шарафутдинов М.Р.[3,4]

1 – Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова, Барнаул, Россия

2 – Институт водных и экологических проблем СО РАН, Барнаул, Россия

3 – Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

4 – ЦКП «Сибирский кольцевой источник фотонов» Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

anicpt@rambler.ru

Контролируемый отжиг проводился в условиях синхротронного излучения [1, 2], что позволило в динамике исследовать фазовые перестройки структуры. Использовалось излучение от накопителя электронов ВЭПП-3 в лаборатории «Методы синхротронного излучения» на станции 5-Б Института ядерной физики СО РАН им. Г. И. Будкера (Россия, г. Новосибирск). Исследования проводились «in situ» в высокотемпературной вакуумной печи. Непрерывную съемку проводили на монохроматическом излучении с длиной волны 1,505 Å. Угловой диапазон 2θ = 31°–64° выбран с учетом углового расположения отражений основных фаз исследуемых систем. Регистрацию дифрактограмм проводили от комнатной температуры (25 °С) до 1350 °С. Время накопления кадра составляло 2 мин.

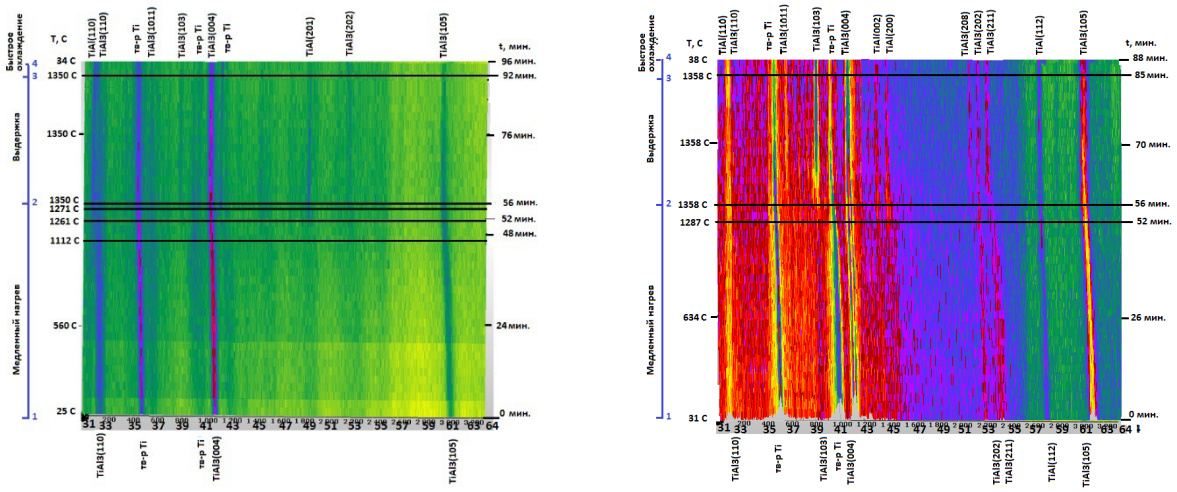
Отжиг проводился для порошковой смеси состава Ti (64 мас. %) + Al. Далее образцы готовились по схеме: 1) предварительная механоактивация [3] порошковых смесей в шаровой мельнице АГО-2 в течение 11 мин.; 2) синтез активированных смесей в низкотемпературном режиме с выдержкой системы в течение 5 мин. [4]; 3) ударно-волновое воздействие на механокомпозиты и продукты после спекания [5].

На рис. 1 представлена 2D проекция последовательности дифрактограмм, снятых в условиях контролируемого отжига образцов механокомпозита и спеченного из него продукта после ударно-волнового воздействия в проточном реакторе импульсного действия. Полученные образцы находились в неравновесном состоянии, с различным содержанием аморфных и кристаллических составляющих. Цветовая гамма поля соответствует интенсивности линий соответствующих фаз.

Дифракционное поле можно разделить на три участка: 1-2 – область медленного нагрева системы; 2-3 – выдержка системы; 3-4 – область быстрого охлаждения.

In situ выявлено, что в образцах механокомпозита и спеченного продукта уже на этапе медленного нагрева происходят процессы, связанные с упорядочением структуры. Для механокомпозита, начиная с 1112 °С, из «размытой» области появляется линия, соответствующая твердому раствору на основе Ti. С 1260 °С возрастает интенсивность линий интерметаллидных соединений TiAl и $TiAl_3$. Во время выдержки при 1350 °С появляются дополнительные слабовыраженные линии $TiAl_3$ и TiAl. Для спеченного образца при 1287 °С,

на этапе медленного нагрева появляются «размытые» дополнительные линии TiAl. Во время выдержки при 1350 °С на дифракционном поле регистрируется ярко выраженная линия дополнительного пика $TiAl_3$, возрастает интенсивность, также появляются слабо выраженные дополнительные линии $TiAl_3$ (208) и $TiAl_3$ (1011).



а) *б)*

Рис. 1. Проекция дифракционного поля при нагреве механокомпозита Ti + Al (а) и спеченного из него продукта (б) после ударно-волнового воздействия

При in situ отжиге спеченного образца также происходят изменения профилей и интенсивностей линий на дифракционном поле. При температуре 1287 °С (на участке медленного нагрева) появляются «размытые» дополнительные линии TiAl (002) и TiAl (200). Во время отжига при 1350 °С, возрастает интенсивность пика $TiAl_3$ (103), на дифракционном поле регистрируется ярко выраженная линия, также появляется слабо выраженные дополнительные линии $TiAl_3$ (208) и $TiAl_3$(1011).

После отжига образцов при температуре 1350-1358 °С в течение порядка 30 мин. с медленным нагревом и быстрым охлаждением в конечных образцах, при сохранении качественного фазового состава, наблюдается повышение интенсивности дифракционных пиков с уменьшением ширины профилей, что свидетельствует о начале перехода системы в равновесное состояние. В состав конечных образцов входят $TiAl_3$, TiAl и твердый раствор Ti.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного Задания FZMM-2023-0003.

Литература:

[1] Evdokov O.V., Titov V.M., Tolochko B.P., Sharafutdinov M.R. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2009. Vol. 603, Iss. 1-2. P. 194–195.

[2] Баранов Е.А., Замчий А.О., Лунев Н.А., Меркулова И.Е., Володин В.А., Шарафутдинов М.Р., Шаповалова А.А. // Прикладная механика и техническая физика. 2022. Т. 63. № 5 (375). С. 33-41.

[3] Levashov E.A., Mukasyan A.S., Rogachev A.S., Shtansky D.V. // International Materials Reviews. 2017. Vol. 62, Iss. 4. P. 203–239.

[4] Sobachkin A.V., Filimonov V.Yu., Loginova M.V., Sitnikov A.A., Yakovlev V.I., Negodyaev A.Z., Myasnikov A.Yu., Roznyj A.A. // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2024. Vol. 18, № S1. P. S146-S153.

[5] Логинова М.В., Собачкин А.В., Ситников А.А., Яковлев В.И., Мясников А.Ю., Филимонов В.Ю. // Физика горения и взрыва. 2024. Т. 60, № 5. С. 86-97.

УД-27

Оценка накопленной деформации и поврежденности металлов методами дифракции синхротронного излучения

Блюменштейн В.Ю., Кречетов А.А., Махалов М.С., Нерсисян Д.А., Учайкин С.Е., Останин О.А.
ФГБОУ ВО «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева», Кемерово, Россия
blumenstein.vu@gmail.com

Создание Центра коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» (ЦКП СКИФ) открывает уникальные перспективы для развития исследований в области фундаментальных закономерностей накопления пластической деформации и разрушения металлов.

В процессе пластического деформирования происходит накопление деформации. Для оценки уровня накопленной деформации обычно используют инвариантные величины тензоров и девиаторов деформаций или скоростей деформаций сдвига. Например, используется степень деформации сдвига Λ, полученная интегрированием интенсивности скоростей деформации сдвига H, определяемой через второй инвариант девиатора скоростей деформаций сдвига.

При проектировании технологических процессов, сопровождающихся пластической деформацией, существенную значимость имеет вопрос о накоплении поврежденности и прогнозировании возможного разрушения металла при обработке.

Величина поврежденности металла оценивается как отношение накопленной деформации к предельной деформации (степень исчерпания запаса пластичности Ψ). При этом важным является тот факт, что значение предельной деформации зависит не только от свойств материала, но и от характера напряженного состояния. Очевидно, что при всестороннем сжатии возможная пластическая деформация будет существенно выше, чем при всестороннем растяжении.

Основная сложность при аналитической оценке поврежденности возникает вследствие сложного характера накопления поврежденности при изменении напряженного состояния и траектории деформации (то есть изменения ориентации осей тензора главных деформаций) в процессе пластического деформирования. В этих условиях закономерности накопления поврежденности изменяются, происходит частичное залечивание ранее накопленной поврежденности.

Для расчета значения поврежденности в условиях сложного немонотонного нагружения предложено большое количество критериев, большей частью деформационных или энергетических. К сожалению, разработанные критерии весьма субъективны, о чем свидетельствует зачастую существенная разница результатов расчетов одних и тех же условий по разным критериям.

Гипотезой настоящего исследования является предположение о том, что существуют такие параметры дифракции синхротронного излучения, которые однозначно зависят либо от накопленной деформации, либо от накопленной поврежденности. Иными словами, по

показателям дифракции синхротронного рентгеновского излучения можно определить и значение накопленной деформации, и значение накопленной поврежденности.

В настоящее время в рамках подготовки к проведению исследований выполнена предварительная обработка экспериментальных образцов по нескольким простым траекториям нагружения, что обеспечило накопление разных значений поврежденности для одинаковых значений деформации металла.

В рамках планируемых исследований на СКИФ предполагается проведение дифракционных измерений на специализированной экспериментальной установке. Ключевым объектом анализа станут параметры дифракционных пиков – положение, ширина и относительная интенсивность, которые чувствительны к плотности дислокаций, микронапряжениям и зарождению микроповреждений. Планируется сопоставление эволюции этих параметров с величиной накопленной деформации и степенью исчерпания запаса пластичности, рассчитанными для режимов обработки экспериментальных образцов. Такое сопоставление позволит выделить независимые показатели деформации и поврежденности.

В мировой практике показана высокая эффективность применения дифракции синхротронного излучения для изучения механизмов возникновения и эволюции деформации и поврежденности (например, [1-3]). Эти результаты демонстрируют потенциал метода для регистрации тонких микроструктурных изменений, которую невозможно реализовать с использованием других методов исследования.

Результаты экспериментальных исследований на базе ЦКП СКИФ позволят получить новые фундаментальные знания в области механики деформированного твердого тела. В связи с широким использованием показателей поврежденности в теориях технологических процессов, сопровождающихся пластической деформацией, результаты будут использоваться для развития теории технологии машиностроения и теории обработки металлов давлением.

Литература:

[1] Xiong Y., Karamched P. S., Nguyen C.-T., Collins D. M., Magazzeni C. M., Tarleton E., Wilkinson A. J. Cold creep of titanium: Analysis of stress relaxation using synchrotron diffraction and crystal plasticity simulations // Acta Materialia. — 2020. — Vol. 199. — P. 561–577. — DOI: 10.1016/j.actamat.2020.08.010.
[2] Li S., Wang Y., Che Z., Liu G., Ren Y., Wang Y. Investigations of deformation-induced δ→ζ phase transformation in zirconium hydride by in situ high-energy X-ray diffraction // Acta Materialia. — 2017. — Vol. 140. — P. 168–175. — DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.047.
[3] Chen W. W., Hudspeth M. C., Claus B., Parab N. D., Black J. T., Fezzaa K., Luo S. N. In situ damage assessment using synchrotron X-rays in materials loaded by a Hopkinson bar // Philosophical Transactions of the Royal Society A. — 2014. — Vol. 372. — Article 20130191. — DOI: 10.1098/rsta.2013.0191.

УД-28

Формирователи рентгеновского пучка на основе элементов преломляющей оптики для когерентных источников излучения

Зверев Д.А.[1], Кузнецов С.М.[2], Юнкин В.А.[2], Снигирев А.А.[1]
1 – Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
2 – Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН (ИПТМ РАН), Черноголовка, Россия
dzverev@kantiana.ru

Стремительное развитие источников синхротронного излучения, подразумевающее увеличение их спектральной яркости, улучшение когерентных и коллимационных свойств генерируемого рентгеновского пучка ставит задачу создания рентгеновской оптики нового поколения, оптические свойства которой выходят далеко за рамки простых функций коллимации и фокусировки. Новая оптика способна формировать амплитуду и фазу волнового фронта пучка практически с полной свободой, позволяя раскрыть весь потенциал яркого, направленного синхротронного излучения. Такие формирователи пучка могут быть эффективно использованы как в современных когерентных методах исследования, так и в задачах диагностики источника, транспорта и подготовки рентгеновского пучка. В настоящей работе представлены два класса таких оптических элементов на основе преломляющих линз.

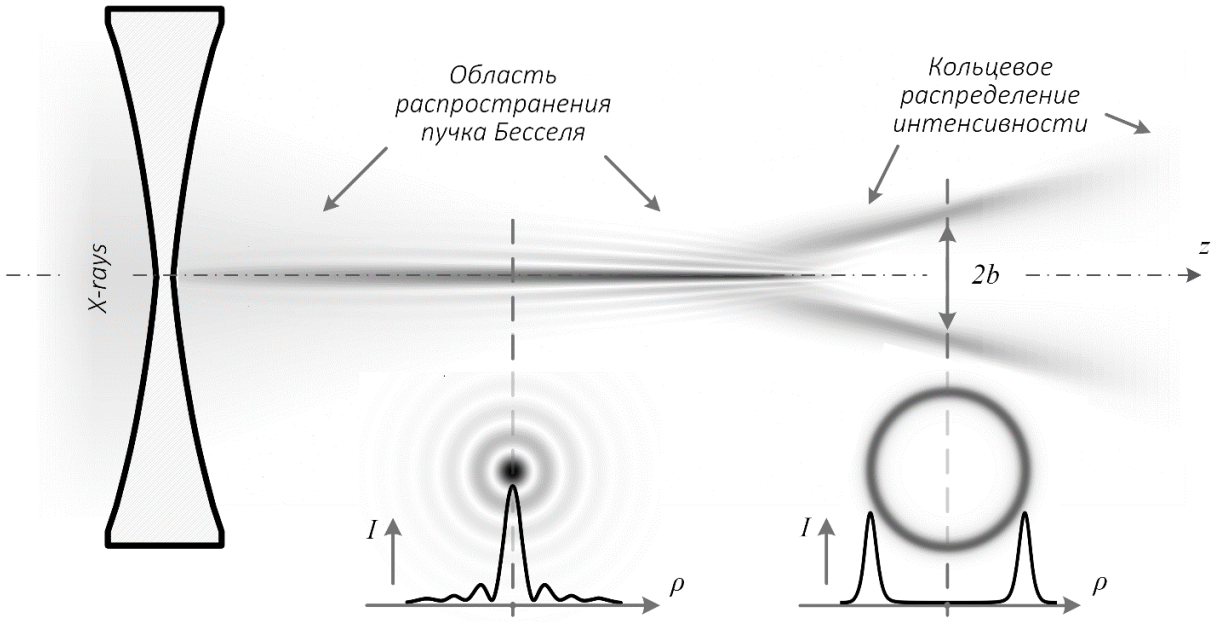


Рис. 1. Схематическое изображение пучка формируемого параболическим аксиконом.

Одним из наиболее ярких примеров формирователей пучка является рентгеновский преломляющий параболический аксикон [1]. При когерентном освещении параболический аксикон генерирует пучок Бесселя, распространяющийся вдоль оптической оси, а также кольцевой пучок, формируемый в дальнем поле (Рис. 1). Такие оптические преобразования могут значительно упростить некоторые существующие оптические схемы современных рентгеновских методов исследования или даже привести к совершенно новым экспериментальным схемам на основе когерентных источников излучения. В работе

предложены методы диагностики источника и юстировки оптических систем, а также разработаны новые подходы субмикронной фокусировки и фазово-контрастной микроскопии с использованием уникальных оптических свойствах параболического аксикона [2].

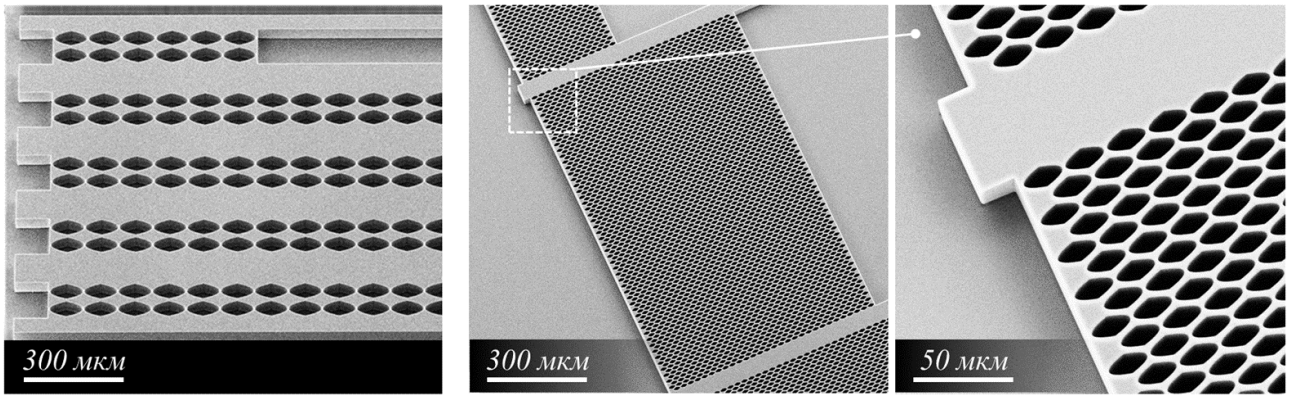


Рис. 2. СЭМ изображения двухлинзового и 100-линзового интерферометров.

Другим важным для практического применения классом формирователей пучка на основе преломляющих линз являются рентгеновские интерферометры. В работе продемонстрированы планарные кремниевые двухлинзовые и многолинзовые интерферометры (Рис. 2), способные преобразовать падающее когерентное излучение в периодическое распределение интенсивности в пространстве [3,4]. При когерентном освещении такие линзовые системы создают множество взаимно когерентных пучков формирующих устойчивую интерференционную картину полос в области, где они перекрываются. Рассматриваемые интерферометры могут быть использованы в широком диапазоне энергий рентгеновского излучения (то 2 до 200 кэВ), при этом область их применения не ограничивается методами интерферометрии и может быть также расширена в область диагностики источника, подготовки и формирования рентгеновского пучка [5]. Более того, предложенные интерферометры открывают новые возможности для развития подходов фазово-чувствительной визуализации [6].

Литература:

[1] D. Zverev, et al. // Opt. Express 25, 28469–28477 (2017).
[2] D. Zverev, et al. // Proc. SPIE 11493, 114930K (2020).
[3] A. Snigirev, et al. // Phys. Rev. Lett. 103, 064801 (2009).
[4] A. Snigirev, et al. // Opt. Express 22, 25842–25852 (2014).
[5] D. Zverev, et al. // Opt. Express 29, 35038–35053 (2021).
[6] D. Zverev, et al. // Opt. Express 28, 21856–21868 (2020).

УД-29

XANES исследование магнитных свойств галогенидных комплексом Re(IV)

Асанов И.П., Федоренко А.Д., Бердюгин С.Н.
Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия
asan@niic.nsc.ru

Рентгеновская спектроскопия поглощения с использованием синхротронного излучения широко используется для изучения локального окружения исследуемых атомов, и получения информации об электронной структуре соединений.

Октаэдрические галогенидные комплексы Re(IV) являются перспективными соединениями, имеющими потенциал для получения материалов с высокой плотностью хранения информации. Такие многообещающие свойства комплексов связаны с большой величиной спин-орбитального взаимодействия для 5d металлов и искажением локальной структуры атомов Re. Задачей работы является исследование изменения электронной структуры и магнитных свойств комплексов Re при химической модификации.

В качестве основного метода исследования электронной структуры используется спектроскопия XANES, которая является элементно-селективным методом и орбитально-чувствительным методом исследования. Для изучения распределения Re 5d незанятой электронной плотности измерены Re L3 спектры поглощения. Как было показано в ряде работ [1, 2], для исследования металлов с сильным спин-орбитальным взаимодействием недостаточно исследовать только L3-края 5d-металлов, и необходимо измерять L2-края поглощения. Кроме этого, для 5d металлов может быть полезен L1-край поглощения, поскольку переход 2s-6p является нелокализованным и не имеет интенсивной белой линии, как для L3 края, но он сильно гибридизуется с электронами соседних атомов, что делает это край чувствительным к взаимодействиям до 4-5Å.

Проведены измерения магнитных свойств. Показано, что при комнатной температуре вплоть до гелиевых температур комплексы Re(IV) показывают парамагнитный характер магнитной восприимчивости. При температуре ~ 11-12 K происходит антиферромагнитный переход. При этом с увеличением размера катиона эффективный магнитный момент на атоме Re при комнатной температуре увеличивается, температура антиферромагнитного перехода уменьшается. По результатам моделирования температурной зависимости магнитной восприимчивости рассчитаны значения параметров магнитного взаимодействия для различных составов комплексов.

На основании измеренных Re L3 и L2 краев поглощения изучено изменение зарядового состояния на атоме Re при катионном замещении, оценены параметры спин-орбитального взаимодействия. Проанализировано влияние спин-орбитального взаимодействия на искажение октаэдрического окружения Re и магнитные свойства соединений, и влияние магнитного упорядочения на форму спектров поглощения.

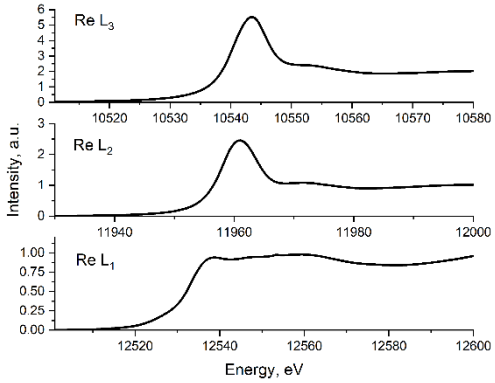


Рис. 1. XANES спектры Re $L_{1,2,3}$ краев поглощения в комплексе $(NH_4)_2$ $ReCl_6$

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 25-22-00228

Литература:

[1] Федоренко А.Д., Асанов И.П., Асанова Т.И., Васильченко Д.Б., Николенко А.Д. // Изв. РАН. сер. физ. 2023. Т. 87, № 5. С. 738-746.

[2] Асанов И. П., Федоренко А. Д., Васильченко Д. Б, и др. // Поверхность. 2023. № 6, С. 3–14.

УД-30

Размерный эффект магнитного перехода в ультрамалых наночастицах ε-Fe_2O_3 по данным метода ядерного рассеяния вперёд

Князев Ю.В.[1], Балаев Д.А.[1], Дубровский А.А.[1], Семёнов С.В.[1], Кириллов В.Л.[2], Мартьянов О.Н.[2]
1 – Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН Красноярск, Россия
2 – Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
yuk@iph.krasn.ru

Представлены результаты исследования особенностей магнитной структуры магнитного наноматериала с рекордной коэрцитивной силой ε-Fe_2O_3 [1,2] с помощью синхротронной методики ядерного рассеяния вперёд (Nuclear Forward Scattering, NFS) на поляризованном излучении во временном масштабе поглощения. Для эксперимента использован образец с изолированными наночастицами ε-Fe_2O_3 со средним размером <d> = 3.8 нм, которые были внедрены в матрицу ксерогеля SiO_2. Спектры NFS были получены в диапазоне температур 4–290 К в нулевом внешнем магнитном поле и поле H=4 Тл, приложенном в продольном направлении параллельно потоку синхротронного излучения (рис.1). Характер изменения значения сверхтонкого поля на ядрах атомов ^{57}Fe (H_{hf}) в зависимости от внешнего магнитного поля во всём диапазоне температур продемонстрировал монотонное увеличение величины H_{hf} во внешнем поле, в отличие от крупных частиц [3,4].

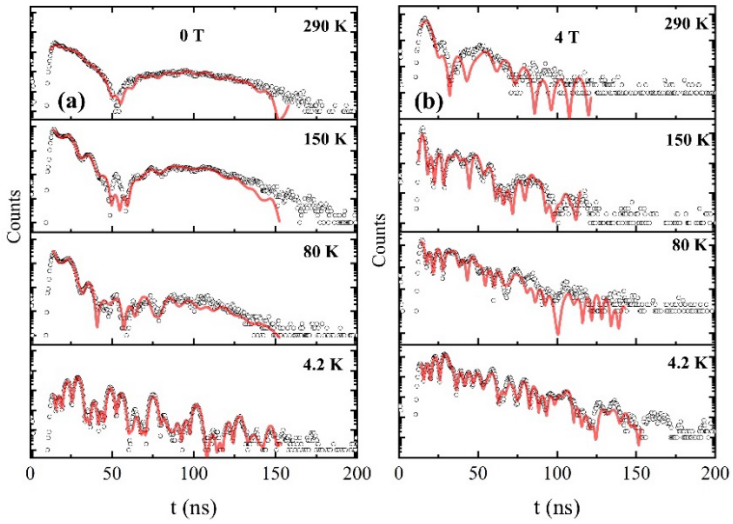


Рис.1. NFS спектры образца наночастиц ε-Fe_2O_3 со средним размером 3.8 нм в диапазоне температур 4–290 К без внешнего магнитного поля (a) и во внешнем магнитном поле 4Тл (b).

Полученные результаты позволяют заключить, что для частиц ε-Fe_2O_3, обладающих ультрамалым размером (менее 8–9 нм), магнитный переход в температурной области 80-150 К отсутствует, а магнитная структура является неколлинеарной во всей области температур 4-290 К.

Благодарности: Работа выполнена в рамках Государственного задания Института физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

[1] E. Tronc, C. Chanéac, and J. P. Jolivet, J Solid State Chem. 1998. V.139, 93.
[2] J. Tuček, R. Zbořil, A. Namai, and S. Ohkoshi, Chemistry of Materials. 2010. V. 22, 6483.
[3] D. A. Balaev, Yu. V. Knyazev, S. V. Semenov, et al., Ceram Int. 2025. V. 51, 650.
[4] Yu. V. Knyazev, A. I. Chumakov, A. A. Dubrovskiy, Phys Rev B. 2020. V. 101, 094408.

УД-31

Темплатная кристаллизация органических полупроводников

Сонина А.А.[1,2], Чешкина Д.С.[1], Коскин И.П.[1], Казанцев М.С.[1]
1 – Институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
belalina04@gmail.com

Контроль кристаллизации органических сопряженных малых молекул имеет важное значение для разработки высокопроизводительных органических оптоэлектронных устройств следующего поколения. Одним из перспективных методов направленной кристаллизации является кристаллизация на темплатной поверхности [1]. Темплатная кристаллизация относится к гетерогенному зародышеобразованию растворенного вещества и используется для контроля полиморфизма, формы и размера кристаллов, а также для получения высококачественных монокристаллов для рентгеноструктурного анализа.

В данной работе исследованы два примера темплатной кристаллизации: 1 – кристаллизация органического люминофора 9,10-дифенилантрацена (DPA), где в качестве темплатной поверхности использовались монокристаллы пирена, перилена, антрацена и рубрена (RUB) [2]; и 2 – кристаллизация сопряженных малых молекул (пирен, перилен, DPA, RUB) на нецентросимметричных полярных монокристаллах 2,7-дифенил-9H-флуорен-9-она (DPFO) [3]. Кристаллизация DPA в присутствии пирена и перилена приводила к образованию их со-кристаллов, тогда как кристаллизация с антраценом и триклинным полиморфом рубрена (Tricl-RUB) не влияла на полиморфизм DPA. Примечательно, что кристаллы ромбического рубрена (Orth-RUB), использованные в качестве темплатов, способствовали кристаллизации нового ромбического полиморфа DPA (δ-DPA) на боковых гранях кристаллов-темплатов (рис. 1а). Orth-RUB и δ-DPA имеют одинаковую паркетную упаковку, образованную C-H···π взаимодействиями, что указывает на эпитаксиальный рост новой фазы (рис. 1б). Кристаллы δ-DPA имеют люминесценцию в синей области и более высокий квантовый выход фотолюминесценции 52% по сравнению с термодинамически стабильной α-DPA (25%) (рис. 1в).

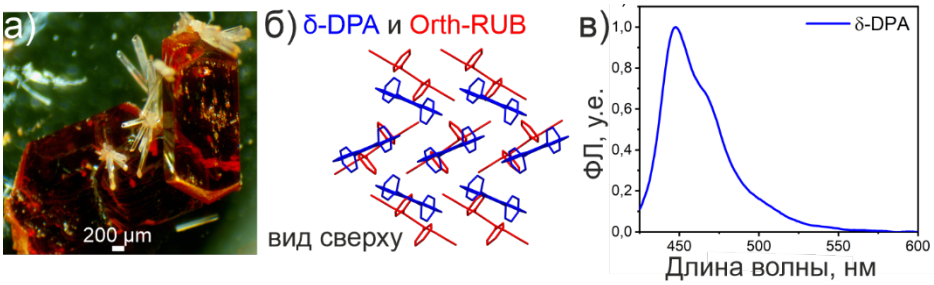


Рис. 1. Оптические изображения игольчатых кристаллов δ-DPA (полупрозрачные) в присутствии красных кристаллов Orth-RUB в отраженном свете (а); наложенные паркетные упаковки δ-DPA и Orth-RUB (б); спектр фотолюминесценции кристаллов δ-DPA (в).

Далее, на примере DPFO показан эффект однонаправленной кристаллизации монокристаллов Tricl-RUB вдоль направления кумулятивного дипольного момента DPFO (Рис. 2а). Показано, что для темплатного роста кристаллов на поверхности необходимо совпадение параметров элементарной ячейки кристаллизуемого материала и темплата. Молекулярная

ориентация кристаллов рубрена на поверхности темплата указывает на эпитаксиальную природу эффекта за счет образования C-H···π взаимодействий (Рис. 2б). Согласно квантово-химическим расчетам, электростатические взаимодействия на поверхности полярного DPFO играют основную роль в направленной кристаллизации Tricl-RUB (Рис. 2в, г). Для демонстрации практического применения кристаллизации были измерены полупроводниковые свойства монокристаллов Tricl-RUB, выращенных на DPFO. Кристаллы продемонстрировали подвижность дырок 0.04 см2/В·с, сопоставимую со значениями чистых кристаллов Tricl-RUB.

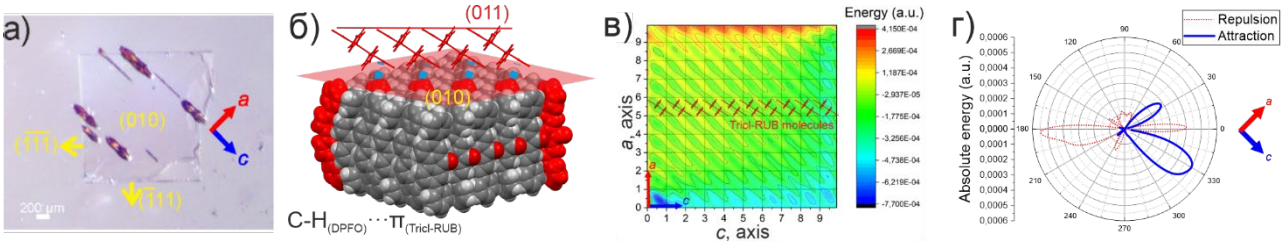


Рис. 2. Оптическое (а) и схематическое (б) изображение игольчатых кристаллов Tricl-RUB (красные) в присутствии темплата DPFO в отраженном свете. Поверхность потенциальной энергии (в) и угловая энергетическая диаграмма (г) взаимодействия рубрена с поверхностью DPFO.

Таким образом, темплатная кристаллизация является мощным инструментом для создания высокопроизводительных функциональных материалов в органической электронике, чьи результаты можно использовать при создании новых материалов в других областях.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-73-01263.

Литература:

[1] Parambil, J. V., Poornachary, S. K., Heng, J. Y. Y., Tan, R. B. H. // CrystEngComm. 2019, 21 (28), 4122-4135.
[2] Sonina, A. A., Cheshkina, D. S., Kazantsev, M. S. // Cryst. Growth Des. 2024, 24 (19), 7888-7896.
[3] Sonina, A. A., Cheshkina, D. S., Koskin, I. P., Becker, C. S., Kazantsev, M. S. // Cryst. Growth Des. 2025, 25 (14), 5457-5466.

УД-32

Синтез каталитически активных моно- и полиядерных карбоксилатных соединений платины и палладия

Якушев И.А.[1], Панина М.В.[1,2], Сосунов Е.А.[1,2]
1 – Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия
2 – РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
ilya.yakushev@igic.ras.ru, cs68@mail.ru

Гетеробиметаллические комплексные и кластерные соединения на основе металлов платиновой группы являются классом соединений, использующемся для проведения каталитических процессов как в гомогенном [1], так и в гетерогенном виде – как предшественники нанесенных каталитически активных материалов [2]. Среди этих соединений отдельно выделяются карбоксилатно-мостиковые биметаллические комплексы, легко распадающиеся в мягких условиях до металлических или металл-оксидных фаз [3], и не содержащих в своем составе трудноудаляемых при термолизе элементов («каталитических ядов», серы, фосфора, хлора и т.д.). В связи с этим практически полезным свойством карбоксилатных соединений, а также способности образовывать мостиковые связи между атомами разных металлов, разрабатываются новые способы получения и изучаются свойства карбоксилатов платины, палладия и других благородных металлов. В данной работе показаны оптимальные стратегии синтеза карбоксилатных моно- (Рис. 1а) и полиядерных соединений палладия и платины (Рис. 1б), а также результаты каталитических испытаний и применение синхротронного излучения для полной характеризации перспективных каталитически активных материалов.

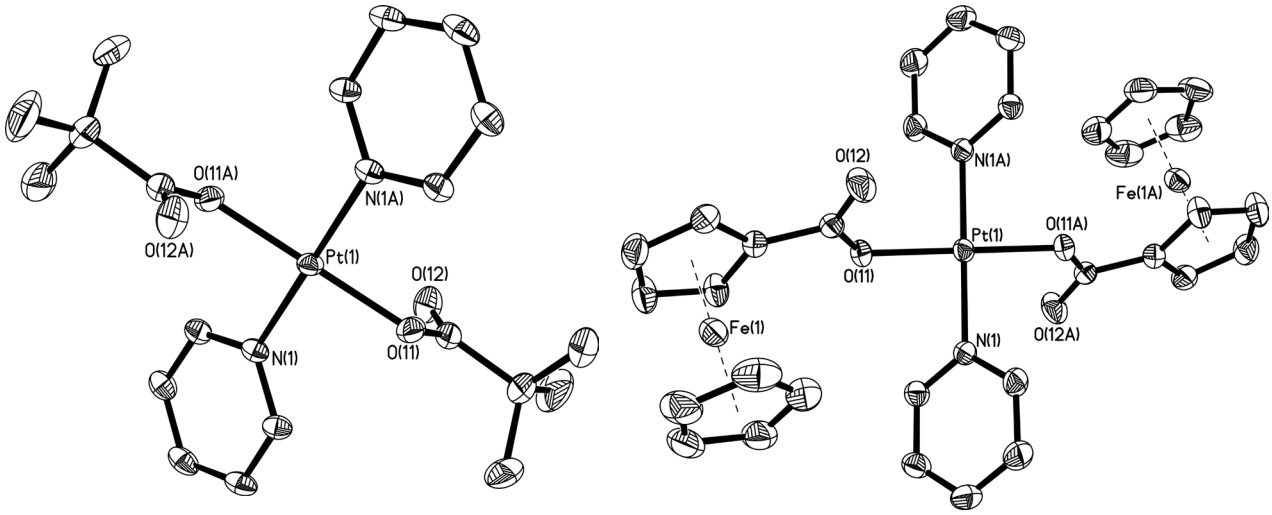


Рис. 1. Молекулярные структуры комплексов – предшественников катализаторов

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ИОНХ РАН.

Литература:

[1] Hu Y., Wang C. // Acta Phys. Chim. Sinica.2019. V. 35 , pp. 913-922.
[2] Lichen Liu, Avelino Corma // Chem. Rev. 2023. V. 123, pp. 4855–4933.
[3] Aleksandr Yu. Stakheev, Nadezhda S. Smirnova, Dmitry S. Krivoruchenko, Galina N. Baeva, Igor S. Mashkovsky, Ilya A. Yakushev, Michael N. Vargaftik // Mendeleev Communications. 2017. V. 27, pp. 515-517.

УД-33

Источник сверхкоротких электронных пучков для ультрабыстрой дифрактоскопии

Никифоров Д.А.[1,2,3]

1 – Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера, Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия

3 – Центр коллективного пользования Сибирский кольцевой источник фотонов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук

d.a.nikiforov@inp.nsk.su

В работе представлено описание экспериментальной установки на основе СВЧ-фотопушки, предназначенной для генерации сверхкоротких электронных сгустков с малым эмиттансом и зарядом порядка 1 пКл [1]. В сочетании с мощным фемтосекундным лазером такая электронная пушка позволяет проводить эксперименты типа «накачка-зондирование» с временным разрешением менее 0,1 пс. Особое внимание уделено соответствию параметров выходного электронного пучка требованиям реальных пользовательских экспериментов, в частности, быстрой электронной дифракции, применяемой для исследования фемтосекундных структурных переходов в материалах [2]. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании новых источников электронов для исследовательских комплексов, ориентированных на решение междисциплинарных прикладных задач в области физики, химии и биологии.

Литература:

[1] Н.А. Винокуров, А.М. Барняков, В.Н. Волков и др. Электронные пушки в ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН и перспективы их оснащения фотокатодами с лазерными драйверами нано- и субпикосекундной длительности. Успехи физических наук. Т. 187, №10, 2017, с. 1116-1120.

[2] Nikiforov, D.A., Levichev, A.E., Barnyakov, A.M. et al. Simulation of a Radio-Frequency Photogun for the Generation of Ultrashort Beams. Tech. Phys. 63, 585–592 (2018). https://doi.org/10.1134/S1063784218040163.

УД-34

Применение рентгеновской рефлектометрии и дифракции в скользящей геометрии с использованием синхротронных источников для исследования твердых и жидких подложек и нанесенных на них слоистых структур

Асадчиков В.Е.[1], Рощин Б.С.[1], Волков Ю.О.[1], Тихонов А.М.[2], Нуждин А.Д.[1]
1 – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
2 – Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, Москва, Россия
asad@crys.ras.ru

В работе представлены теоретические подходы и экспериментальные результаты, полученные при исследовании твердых подложек из различных материалов для широкого класса применений. Проведен анализ оборудования и экспериментальных работ на современных синхротронных источниках [1, 2]. Представлены результаты, полученные авторами и их сравнение с данными атомно-силовой микроскопии и оптических измерений [3, 4]. Рассмотрены результаты решения обратной задачи рентгеновской рефлектометрии при исследовании нанесенных на такие подложки однослойных и многослойных покрытий [4, 5]. Эти результаты сопоставлены с данными просвечивающей электронной микроскопии [6, 7]. Отдельно рассмотрены возможности метода для исследования поверхности жидких фаз и нанесенных на них органических плёнок [8–10]. В случае [9] результаты сопоставлялись с данными молекулярно-динамических расчётов и показано их хорошее соответствие.

Благодарности: Проведение рентгеновских экспериментов было осуществлено в рамках соглашения о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии (с Минобрнаукой) № 075-15-2025-458 и госзадания НИЦ «Курчатовкий институт».

Литература:

[1] https://www.esrf.fr/UsersAndScience/Experiments/CBS/ID10
[2] https://www.esrf.fr/UsersAndScience/Experiments/StructMaterials/ID31
[3] Занавескин М.Л., Занавескина И.С., Рощин Б.С. и др. // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2006. №3. С. 80–82.
[4] Кожевников И.В., Воронов А.С., Рощин Б.С. и др. // Кристаллография. 2006. Т. 51. №. 6. С. 1146–1152.
[5] Асадчиков В.Е., Кожевников И.В., Рощин Б.С. и др. // Мир измерений. 2012. №7. С. 22–28.
[6] Tholapi R., Karateev I.A., Roshchin B.S. et al. // Journal of Applied Physics. 2017. V.121. P. 205308.
[7] Асадчиков В.Е., Волков Ю.О., Дьячкова И.Г. и др. // Кристаллография. 2019. Т.64. №5. С. 776–780.
[8] Асадчиков В.Е., Волков Ю.О., Рощин Б.С. и др. // Кристаллография. 2023. Т.68. №1. С. 94–99.
[9] Ermakov Yu.A., Asadchikov V.E., Roschin B.S. et al. // Langmuir. 2019. V.35. P. 12326–12338.
[10] Тихонов А.М., Волков Ю.О., Асадчиков В.Е., Рощин Б.С. // ЖЭТФ. 2025. Т. 168. Вып. 2 (8). С. 266–275

УДм-01

Скоростная рентгенография ударно-волнового сжатия пластикового гироида

Асылкаев А.М.[1,2,3], Тен К.А.[2], Рубцов И.А.[1,2], Прууэл Э.Р.[2], Кашкаров А.О.[2], Туманик А.С.[1,2], Халеменчук В.П.[2], Студенников А.А.[2]

1 – Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов", Кольцово, Россия

2 – Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

3 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

a.m.asylkaev@srf-skif.ru

Внедрение аддитивных технологий упрощает создание энергопоглощающих элементов для аэрокосмической и оборонной сфер. Точное цифровое производство позволило заменить тяжелые цельнолитые детали на легкие сетчатые структуры, например, гироидные. Подобные конструкции обеспечивают превосходные прочностные свойства при минимальном весе, что критически важно для противодействия ударным нагрузкам.

В данной работе исследовалось ударно-волновое сжатие пластиковых гироидных структур с помощью синхротронного излучения (СИ). СИ производит когерентные импульсы с фиксированными временными интервалами, что является его преимуществом перед традиционными источниками. После прохождения апертуры излучение формирует периодические наносекундные всплески (менее 1 нс). Эта уникальная особенность открывает возможность для создания рентгеновской высокоскоростной съёмки, позволяя получать «рентгеновское кино». В наших экспериментах источник СИ — релятивистские электроны, движущиеся по накопительному кольцу ВЭПП-3 в ИЯФ СО РАН (энергия электронов: 2.0 ГэВ, индукция вигглера: 2 Тл). Ключевой элемент измерительной системы — уникальный рентгеновский детектор DIMEX. Он регистрирует распределение плотности потока рентгеновского излучения за время, меньшее чем интервал между импульсами, и сохраняет 100 кадров, формируя "динамическое рентгеновское кино" [1].

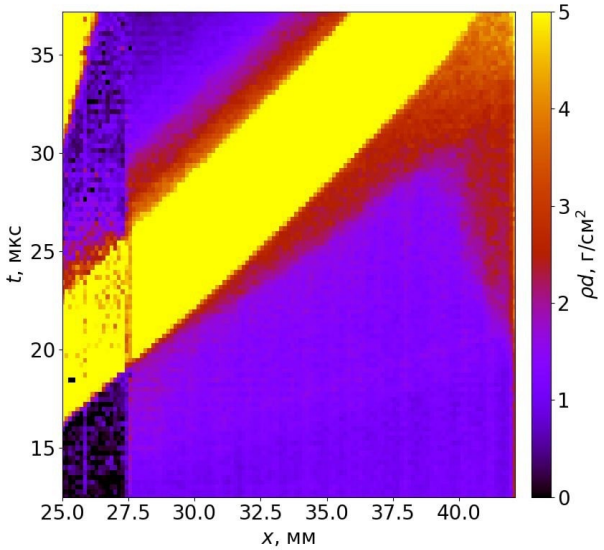


Рис. 1. Масса пластикового гироида вдоль луча СИ

В данной работе изучалось затухание ударной волны и распределение плотности в пластиковом гироиде при ударном нагружении различными ударниками (медь, алюминий,

титан). Для разгона ударника была спроектирована компактная взрывная пушка, метающая ударники (толщина – 4 мм, диаметр – 20 мм) со скоростью от 600 до 3000 м/с (в зависимости от массы взрывчатого вещества). В первых опытах с помощью данной методики было измерено относительное изменение интенсивности вдоль оси алюминия после сжатия сильной ударной волной с последующим пересчетом (благодаря калибровке) в массу вдоль луча СИ, то есть распределение ρd (рис. 1).

Благодарности: Работа выполнена при поддержки Программы «Приоритет-2030», проект «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий», НГУ. Авторы (ЦКП «СКИФ») благодарят Министерство науки и высшего образования РФ за финансовую поддержку в рамках государственного задания ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН.

Литература:

[1] Прууэл Э. Р. [и др.]. Реализация возможностей синхротронного излучения в исследованиях детонационных процессов //Доклады академии наук. – Федеральное государственное бюджетное учреждение" Российская академия наук". – 2013. – Т. 448. – №. 1. – с. 38-38.

УДм-02

In situ рентгеновские исследования фазовых переходов в титановом сплаве Ti-6Al-4V, полученном аддитивной проволочной технологией, при высокотемпературном наводороживании

Камелина К.Д., Панин А.В., Сыртанов М.С., Кашкаров Е.Б.
Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
kdk11@tpu.ru

Применение аддитивных технологий (АТ) в производстве изделий из титанового сплава Ti-6Al-4V имеет высокие перспективы для сокращения времени получения изделий, снижения количества отходов производства и минимизации потребности в механической обработке [1]. Изделия, полученные АТ, применяются в экстремальных условиях, в том числе в водородосодержащих средах при повышенной температуре. Для понимания особенностей взаимодействия аддитивно полученного Ti-6Al-4V с водородом в процессе эксплуатации необходимо исследовать изменение его структурно-фазового состояния, что можно сделать с помощью рентгеновских in situ дифракционных исследований.

В данной работе исследовались образцы титанового сплава Ti-6Al-4V, полученные методом литья и электронно-лучевым плавлением проволоки. Размеры образцов, подготовленных для дифракционных in situ измерений, составляли 5 мм × 5 мм × 0,1 мм. Измерения были выполнены на дифрактометре Shimadzu XRD-7000, оснащенном высокоскоростным детектором MYTHEN 1K (Dectris).

Образцы подвергались нагреву до 450°C с последующим наводороживанием при данной температуре. Нагрев осуществлялся в высокотемпературной камере НТК 2000N. Газовая среда создавалась в системе, разработанной в Томском Политехническом Университете [2].

В таблице 1 представлены данные о фазовом составе исходных образцов.

Табл. 1. Фазовый и химический составы аддитивно полученного и литого образцов Ti-6Al-4V

Образец	Обнаруженные фазы	Содержание фаз, об.%	Элементный состав, масс.%			
			Al	V	Fe	Ti
Аддитивно полученный	α-Ti	94,5	5,1	4,3	0,1	90,5
	β-Ti	5,5				
Литой	α-Ti	96,0	5,3	4,1	0,1	90,5

На первом этапе нагрева образцов наблюдается увеличение параметров решётки α- и β-фаз титана. Для образцов также характерна релаксация микроискажений при нагреве. Микроискажения в аддитивно полученном образце релаксируют быстрее, чем в литом. При этом на финальном этапе нагрева микроискажения в аддитивно полученном образце (~9.1×10^{-3} в α-фазе и ~13×10^{-3} в β-фазе) выше, чем в литом образце (~8×10^{-3} в α-фазе и ~5×10^{-3} в β-фазе). Также аддитивно полученный образец обладает высокими остаточными растягивающими напряжениями (1090 МПа) по сравнению с литым (170 МПа).

По достижении 450°C в камеру с образцами подавался водород. В процессе наводороживания изменения фазового состава литого образца не происходит, так как он практически не сорбирует водород (рис. 1, а). Абсолютная концентрация водорода в нём

после насыщения составила 0,03 масс.%. При этом аддитивно полученный образец активно поглощает водород, и абсолютная концентрация водорода в нём после гидрирования составила 3,4 масс.%. Поглощение аддитивно полученным образцом водорода сопровождается развитием фазовых переходов, представленных на рис. 1, б.

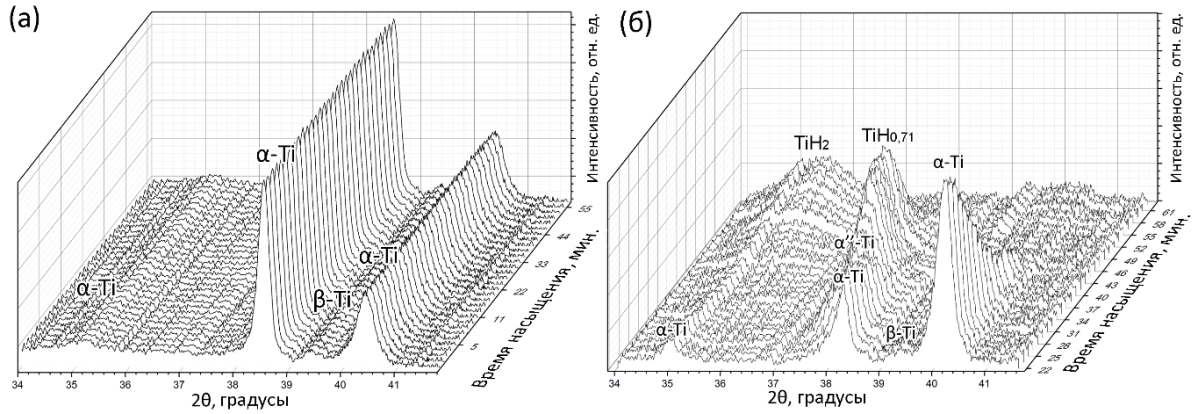


Рис. 1. Дифрактограммы образцов Ti-6Al-4V, полученные в процессе их наводороживания при температуре 450 °С: а – литого; б – аддитивно полученного

На начальной стадии наводороживания (0-28 мин) аддитивно полученного образца Ti-6Al-4V изменений в его фазовом составе не происходит. После 28 минут наводороживания наблюдается уменьшение интенсивности рефлексов α-Ti, наряду с образованием метастабильной мартенситной α''-фазы, интенсивность рефлексов которой возрастает со временем до 37-й минуты наводороживания.

После 37 минут наводороживания появляется рефлекс, соответствующий фазе гидрида титана нестехиометрического состава $TiH_{0.71}$ [3]. Дальнейшее наводороживание приводит к увеличению интенсивности рефлекса (111) $TiH_{0.71}$ наряду с падением интенсивности рефлекса α''-фазы. Полное исчезновение α”-фазы происходит на 48-й минуте наводороживания, когда интенсивность рефлекса $TiH_{0.71}$ достигает максимума. При этом после 46 минут наводороживания наблюдается пик, принадлежащий TiH_2. После 55 минут наводороживания $TiH_{0.71}$ полностью превратился в TiH_2. В течение всего процесса наводороживания в образце сохраняется присутствие β-Ti. Процесс газофазного насыщения водородом при температуре 450°С аддитивно полученного титанового сплава Ti-6Al-4V сопровождается фазовыми переходами α+β → α+β+α'' → α+β+α''+ $TiH_{0.71}$ → β+ α”+ $TiH_{0.71}$ → β + $TiH_{0.71}$+ TiH_2 → β+ TiH_2.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке в рамках Государственного задания, проект № FSWW-2024-0001.

Литература:

[1] Pramanik A. // The International Journal of Advanced Manufacturing Technology. 2013. V.70. P. 919-928.
[2] Syrtanov M., Garanin G., Kashkarov E. et al. // Metals. 2020. V.10. P. 447.
[3] Zhang H., Wang C., Guo J. et al. // Metals. 2024. V. 14. P. 1218.

УДм-03

Анализ трибологических характеристик объемных металлических стекол системы ZrHfAlCo(Ni,Cu) с использованием дифракции синхротронного рентгеновского излучения

Насенник И.Е.[1,2], Батаев И.А.[2]

1 – Федеральный исследовательский центр «Институт катализа имени Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук», Центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов», Кольцово, Россия

2 – Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

i.e.nasennik@srf-skif.ru

Анализ трибологических характеристик объемных металлических стекол системы ZrHfAlCo(Ni,Cu) является актуальной задачей материаловедения в связи с перспективными механическими и трибологическими свойствами этих материалов, что делает их перспективными для применения в узлах трения [1]. Целью данной работы является исследование трибологических характеристик объемных металлических стекол на основе системы ZrHfAlCo(Ni,Cu) для определения их износостойкости и коэффициента трения. Образцы ОМС были получены методом литья вакуумным всасыванием в водоохлаждаемую медную форму с варьированием химического состава по содержанию Ni и Cu [2]. Рентгенофазовый анализ с использованием дифракции синхротронного рентгеновского излучения проводился в режиме “на просвет” на ускорительном комплексе ВЭПП-4 (Институт ядерной физики им. Будкера СО РАН). Анализ механических свойств исследуемых ОМС был разделен на две части (исследование стержней, имеющих аморфную структуру и исследование таблеток, имеющих кристаллическую) включал в себя: трибологические испытания по схеме “шар-плоскость”, анализ микротвердости методом Виккерса, а также исследование морфологии поверхности после износа с помощью растровой электронной микроскопии. Результаты показали, что коэффициент трения зависит от состава сплава, при этом минимальные значения (0,4–0,45) наблюдаются для образцов с добавкой Ti (рис.1). Наибольшая износостойкость была зафиксирована у сплавов с высоким содержанием Co. В процессе испытания наблюдалось выкрашивание частиц материала с поверхности лунки износа, что косвенно свидетельствует о кристаллизации в процессе трения. В заключении, можно сделать вывод – объемные металлические стекла системы ZrHfAlCo(Ni,Cu) демонстрируют высокую износостойкость и относительно низкий коэффициент трения, причем наилучшие трибологические характеристики показали сплавы с Ti и повышенным содержанием Co. Эти материалы перспективны для применения в медицинской отрасли – в качестве материала имплантатов, а также в микромеханических системах, в качестве нагруженных шестерней.

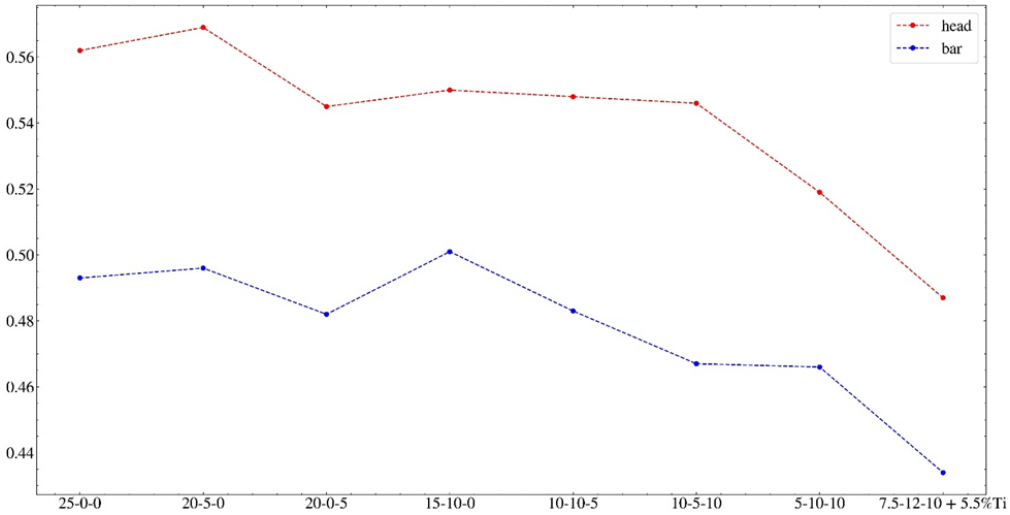


Рис. 1. Изменение коэффициента трения в зависимости от химического состава объемных металлических стекол системы ZrHfAlCo(Ni,Cu)

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FSUN-2024-0005).
Исследования проведены на оборудовании ЦКП «Структура, механические и физические свойства материалов» НГТУ.
Исследования методом синхротронной рентгеновской дифракции выполнены при частичной финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП "СКИФ" Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] Nair B., Priyadarshini B. G. Process, structure, property and applications of metallic glasses //AIMS Materials Science. – 2016. – Т. 3. – №. 3. – С. 1022-1053.
[2] Wada T. et al. Septenary Zr–Hf–Ti–Al–Co–Ni–Cu high-entropy bulk metallic glasses with centimeter-scale glass-forming ability //Materialia. – 2019. – Т. 7. – С. 100372.

УДм-04

Динамика потоков струй при ударном воздействии на металлические пластины с прямоугольными пазами

Халеменчук В.П.[1], Тен К.А.[1], Прууэл Э.Р.[1], Кашкаров А.О.[1], Асылкаев А.М.[1,2,3], Туманик А.С.[1,2], Рубцов И.А.[1,2], Карсанова Т.В.[4]

1 – Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

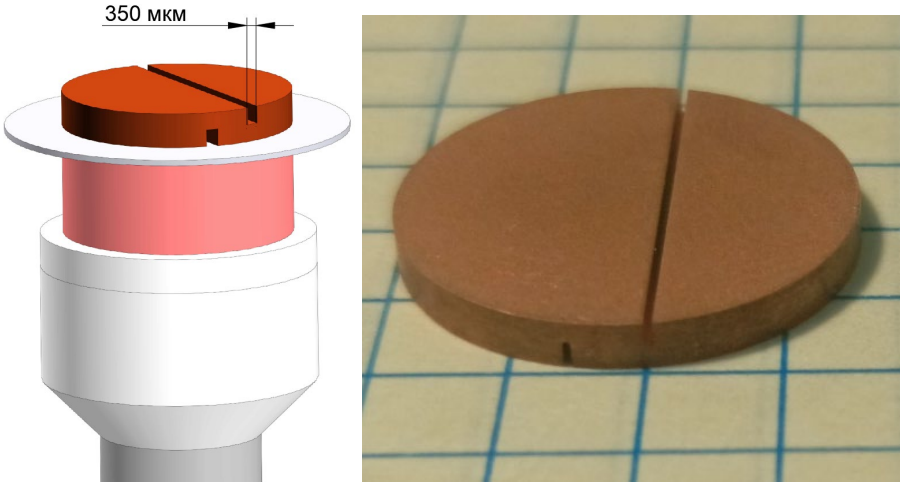
2 – Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов", Кольцово, Россия

3 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

4 –Российский федеральный ядерный центр- Всероссийский научно- исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия

slava.khalemenchuk@mail.ru

В работе исследовались потоки микрочастиц, формируемые в прямоугольных пазах шириной 350 мкм и высотой 1 мм. Пазы располагаются на торцевых поверхностях диска по одной с каждой стороны. Диски изготавливались из материалов медь марки М1 и алюминиевого сплава Д16Т. Для выброса потока микрочастиц диск нагружался ударной волной (УВ) интенсивностью ~ 40 ГПа, что приводило к развитию микровозмущений (неустойчивостей) на свободной поверхности (СП) вещества [1-2].



а *б*

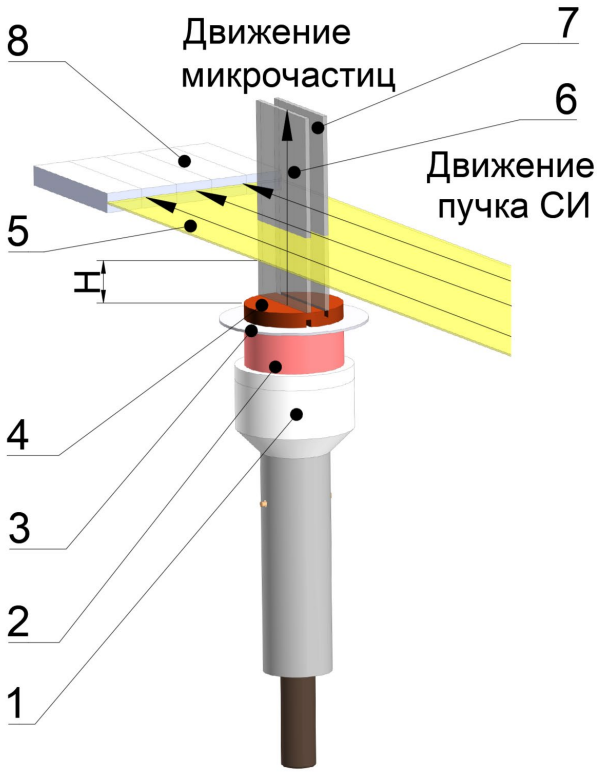
1-генератор плоской ударной волны; 2- заряд ВВ; 3- отсекаетесь; 4- диск с пазами.
а- схема исследуемого паза, б- фотография диска с пазами.
Рис. 1. Исследование потоков микрочастиц диска с пазами из меди марки М1.

Исследование выброса частиц проводилась на станции «Субмикросекундной диагностики», ускорительного комплекса ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН методом импульсной рентгенографии синхротронным излучением с энергией 2 ГэВ и длительностью импульса 1 нс. Регистрация рентгеновской тени проводилась однокоординатным детектором DIMEX записывающим 100 кадров с промежутком времени между кадрами 124 нс [3].

Проведены рентгенографические эксперименты по измерению распределения массы микроструи образуемых из пазов дисков (рис.1, б) при ударно волновом нагружении.

Регистрация потока микрочастиц проводилась в поперечной постановке на расстоянии 10 мм от свободной поверхности диска до пучка. Пазы ориентированы вдоль движения пучка

СИ. Такая постановка позволяет проводить одновременное измерение массы двух потоков микрочастиц.



1- генератор плоской ударной волны; 2- энергетический материал; 3- прокладка; 4- диск с пазамими; 5- пучок СИ; 6- поток микрочастиц из паза на закрытой поверхности диска (4); 7- поток микрочастиц из паза на свободной поверхности диска (4); 8- детектор DIMEX.
Рис. 2. Исследование потоков микрочастиц в поперечной постановке вдоль пучка СИ.

Выброс потока микрочастиц регистрируется из верхнего и нижнего паза между полу дисками. Получена динамика массы потоков двух потоков микрочастиц. Точность измерения распределения линейной плотности составляет 1 мг/см^2.

Литература:

[1] Vyacheslav P. Khalemenchuk, Anastasia A. Glushak, Ivan A. Rubtsov, Konstantin A. Ten, , Eduard R. Pruuel, Alexey O. Kashkarov, “Jet Density Dynamics During Shock Impact on Metal Plate Joints”, IEEE 25th International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM), 2024, pp. 950–953, doi: 10.1109/EDM61683.2024.10614979, Electronic ISBN: 979-8-3503-8923-4, Print on Demand(PoD) ISBN:979-8-3503-5305-1.

[2] Антипов М.В., Георгиевская А. Б., Игонин В.В, Лебедева М.О., Панов К.Н., Утенков А.А., Садунов В.Д., Юртов И.В. Результаты исследований процесса выброса частиц со свободной поверхности металлов под действием ударной волны // Extreme states of substance. Detonation. Shock waves. Proceedings International conference XVII Khariton's topical scientific readings, March 23 – 27, 2015. RFNC-VNIIEF, Sarov.

[3] L.I. Shekhtman, V.M. Aulchenko, A.E. Bondar, V.N. Kudryavtsev, D.M. Nikolenko, P.A. Papushev, E.R. Pruuel, I.A. Rachek, K.A. Ten, V.M. Titov, B.P. Tolochko, V.N. Zhilich, V.V. Zhulanov, “GEM-based detectors for SR imaging and particle tracking”, Journal of Instrumentation, Volume 7, Issue 03 (March 2012). – pp. 1-18, **doi** 10.1088/1748-0221/7/03/C03021.

УДм-05

Анализ EXAFS-спектров NdBaMn2O6 и системы Au-Pt, содержащих область перекрытия сигналов

Хаметова Э.Ф.[1], Бакиева О.Р.[1], Кривенцов В.В.[2]
1 – УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Кольцово, Россия
elinaphanilevna851@gmail.com

В настоящее время огромное внимание научных групп направлено на синтез и исследование новых наноразмерных материалов, в которых функциональные свойства определяются атомным строением. EXAFS спектроскопия является одним из основных инструментов исследования локальной атомной структуры. Среди наноматериалов встречаются системы, EXAFS спектры которых содержат область наложения нескольких сигналов поглощения от разных химических элементов. Так, например, в системе Au-Pt в области поглощения L краёв наблюдается наложение сигнала L_3 Au на сигнал L_3 Pt. Диапазон между краем Pt (11564 эВ) и краем Au (11918 эВ) составляет всего 354 эВ, что создает сложности для выделения полезного сигнала и его количественного анализа. Область за L_3 Au является суммой нескольких волновых чисел, что делает невозможным применение классического метода Фурье-преобразования.

Другим примером может служить система $NdBaMn_2O_6$. В этом случае на EXAFS спектре наблюдается наложение сигнала Nd на сигнал Mn. Как и в случае системы Au-Pt, диапазон между краем поглощения K Mn (6539 эВ) и L_2 Nd (6722 эВ) является недостаточным для корректного определения параметров локальной атомной структуры (183 эВ, что при переводе в k-пространство составляет ~ 6 Å).

В данной работе предложен алгоритм, позволяющий выделить сигнал поглощения каждого элемента. В первом приближении получены результаты для каждого зарегистрированного края поглощения в исследуемых системах. Полученные количественные значения параметров локальной атомно структуры в пределах допустимой погрешности соответствуют литературным данным.

Благодарности: Исследование выполнено с использованием оборудования ЦКП УдмФИЦ УрО РАН в рамках темы государственного задания Отдела ФХП ФТИ УдмФИЦ УрО РАН (№124021900017-1). Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” Института катализа СО РАН им. Борескова. В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ "Комплекс ВЭПП-4–ВЭПП-2000" в ИЯФ СО РАН.

УДм-06

Влияние условий конечной термообработки катализаторов $Ni/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ на их структурную организацию и функционирование в реакции метанирования CO_2

Харченко Н.А.[1,2], Пахарукова В.П.[1], Стонкус О.А.[1], Горлова А.М.[1], Рогожников В.Н.[1], Потемкин Д.И.[1]

1 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

n.kharchenko@g.nsu.ru

Разработка катализаторов для реакции метанирования CO_2 привлекает большое внимание исследователей ввиду перспективности использования данной реакции в технологии хранения получаемого водорода в виде метана, реализуемой на уже существующей инфраструктуре («power-to-gas technology») [1, 2]. Наиболее перспективными материалами для данного процесса являются нанесенные никелевые катализаторы на основе смешанного оксида церия-циркония, характеризующиеся высоким соотношением цена-эффективность в реакции [3, 4]. Считается, что реакция метанирования CO_2 является чувствительной к структуре катализаторов, поэтому при разработке эффективных каталитических систем необходимо устанавливать взаимосвязь между методами приготовления катализаторов, структурой получаемых систем и их функциональными характеристиками. Увеличение активности каталитического материала можно добиться за счет варьирования размера частиц активного металла и увеличения равномерности их распределение по поверхности носителя [5, 6]. Ранее для схожей каталитической системы с рутением $Ru/Ce_{1-x}Zr_xO_2$ нами было показано, что выбор газовой среды (окислительная, восстановительная) для термической обработки прекурсора катализатора влияет на состояние и дисперсность нанесенных частиц активного компонента, а также на уровень взаимодействия металла с носителем [7].

Целью данного исследования является изучение возможности контроля дисперсности частиц активного компонента применительно к никелевым каталитическим системам $Ni/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ путем варьирования газовой среды конечной термообработки предшественников катализаторов. В работе были рассмотрены никелевые катализаторы 9 масс. % $Ni/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$, полученные методом пропитки по влагоемкости с последующей сушкой и термообработкой прекурсоров в различных средах, а именно на воздухе, в инертном газе (Ar, He) и восстановительной H_2-содержащей атмосфере. Для установления влияния условий обработки на состояние и структуру соединений никеля была проведена комплексная структурная диагностика катализаторов в режиме ex situ методами порошковой рентгеновской дифракции, в частности, рентгенографическим методом анализа распределения атомных пар, просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, спектроскопии комбинационного рассеяния света, хемосорбции CO. Также проведены исследования изменений состава и структуры катализаторов в процессе их активации методом in situ порошковой дифракции.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 21-73-20075.

Литература:

[1] S.Rönsch, J. Schneider et al.// Fuel. 2016. V. 166. P. 276.
[2] Bassano C, Deiana P et al.// Fuel. 2019. V. 253. P. 1071–9.
[3] S. Tada, T. Shimizu, et al.// Int. J. Hydrogen Energy. 2012. V. 37. P. 5527.
[4] B. Nematollahi, M. Rezaei et al.// Int. J. Hydrogen Energy. 2015. V. 40. P. 8539.
[5] G. Varvoutis, M. Lykaki et al.// Appl Catal B. 2021. V. 297, P. 120401.
[6] L. Lin et al.// Journal of Energy Chemistry. 2021. V. 61. PP. 602–611.
[7] Pakharukova V.P., Kharchenko N.A. et al.// Colloids and Surfaces A. 2024. V. 702. PP. 134962:1-11

УДм-07

Реконструкция структуры пористых сред методами стохастического моделирования на основе данных малоуглового рассеяния

Черкасов А.М.[1], Абросимов К.Н., Герке К.М.
1 – МФТИ, Физтех, Долгопрудный, Россия
2 – Почвенный институт им. В.В. Докучаева, Россия, Москва

Синхротронное излучение предоставляет уникальные возможности для многоуровневого исследования пористых материалов. На субмикронных масштабах оно применяется для получения трёхмерной томографии с высоким пространственным разрешением и [1]. На меньших масштабах, в диапазоне десятков нанометров, используется метод рентгеновского малоуглового рассеяния (МУР), обеспечивающий усреднённую статистическую информацию о внутренней структуре исследуемых образцов [2-4]. Кривые рассеяния, получаемые в таких экспериментах, напрямую связаны с двухточечными корреляционными функциями, отражающими распределение фаз и геометрию порового пространства. Эти функции широко применяются в задачах стохастического моделирования и восстановления микроструктуры [4].

На основе этих принципов разработаны различные подходы к стохастической реконструкции таких структур, что позволяет получать цифровые модели, воспроизводящие структурные особенности исходного материала [5-8]. Такие реконструкции представляют собой мощный инструмент для изучения наноструктурных систем, в том числе в сочетании с экспериментальными методами типа МУР.

В настоящей работе реализован оптимизационный алгоритм на основе усечённых случайных гауссовых полей, обеспечивающий реконструкцию структуры различных образцов по их автокорреляционным функциям и кривым малоуглового рассеяния. Полученные цифровые модели проходят как визуальную, так и количественную оценку использованием морфологических дескрипторов, что демонстрирует практическую состоятельность подхода, объединяющего МУР и стохастическую генерацию структур на основе корреляционных функций.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Программы Министерства науки и высшего образования №075-03-2025-662 от 17.01.2025.

Литература:

[1] Promentilla M. A. B. et al. Characterizing the 3D pore structure of hardened cement paste with synchrotron microtomography //Journal of Advanced Concrete Technology. – 2008. – Т. 6. – №. 2. – С. 273-286.
[2] Ostafiychuk B. K. et al. SAXS investigation of nanoporous structure of thermal-modified carbon materials //Nanoscale Research Letters. – 2014. – Т. 9. – №. 1. – С. 160.
[3] Gommes C. J. Stochastic models of disordered mesoporous materials for small-angle scattering analysis and more //Microporous and Mesoporous Materials. – 2018. – Т. 257. – С. 62-78.
[4] Gommes C. J., Asset T., Drnec J. Small-angle scattering by supported nanoparticles: exact results and useful approximations //Applied Crystallography. – 2019. – Т. 52. – №. 3. – С. 507-519.

[5] Karsanina M. V., Gerke K. M. Hierarchical optimization: Fast and robust multiscale stochastic reconstructions with rescaled correlation functions //Physical review letters. – 2018. – Т. 121. – №. 26. – С. 265501.
[6] Cherkasov A. et al. Adaptive phase-retrieval stochastic reconstruction with correlation functions: Three-dimensional images from two-dimensional cuts //Physical Review E. – 2021. – Т. 104. – №. 3. – С. 035304.
[7] Roberts A. P. Statistical reconstruction of three-dimensional porous media from two-dimensional images //Physical Review E. – 1997. – Т. 56. – №. 3. – С. 3203.
[8] Torquato S. et al. Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties. – New York : Springer, 2002. – Т. 16.

УДм-08

Нанесённые суб- и наночастицы рутения на мезопористых кислотных углеродных и оксидных носителях для гидрирования углеводов

Голубков В.А.[1,2], Зайцева Ю.Н.[1], Сычёв В.В.[1,2], Еремина А.О.[1], Таран О.П.[1,2]
1 – Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск, Россия
2 – Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
golubkov.va@icct.krasn.ru

Большое внимание в современных науке и технике привлекают одностадийные процессы, в том числе гидролиз-гидрирование растительных полисахаридов в многоатомные спирты (сорбит, ксилит). Разработка высокоэффективных катализаторов гидрирования на носителях с кислотными функциональными группами является актуальной научной задачей.

Нами изучено влияние кислотных свойств поверхности углеродных носителей на размер наночастиц рутения и их каталитическую активность в гидрировании глюкозы [1]. Для получения функционализированной поверхности углеродные носители: мезопористые углеродные материалы Сибунит-4 и СМК-3, окисляли влажным воздухом при 400-500 °С и сульфировали серной кислотой. Окисление влажным воздухом благодаря своей простоте и отсутствию токсичных реагентов является перспективным методом для практического применения. Увеличение количества кислотных групп на поверхности углеродного носителя снижает средний размер рутениевых наночастиц (Рис. 1), что подтверждается DFT-расчётами.

Разработанные катализаторы демонстрируют отличную активность, что позволяет им эффективно работать при низкой температуре 60 °С и 5,5 МПа H_2, за 90 минут приводя к конверсии >90%. Хотя обычно гидрирование глюкозы на рутениевых катализаторах обычно проводится при 90-180 °С. Наибольшую активность в гидрировании глюкозы в обеих сериях демонстрируют катализаторы с частицами рутения размером около 1,6 нм: 2RuSib450 и 2RuCMK (Рис. 1). Размер наночастиц Ru на исходном носителе Сибунит-4 слишком велик для обеспечения высокой каталитической активности, окисление приводит к уменьшению вплоть до оптимального размера. Для носителя СМК-3 модификация не нужна и приводит только к потере каталитической активности, так как исходный размер частиц (около 1,6 нм) является оптимальным.

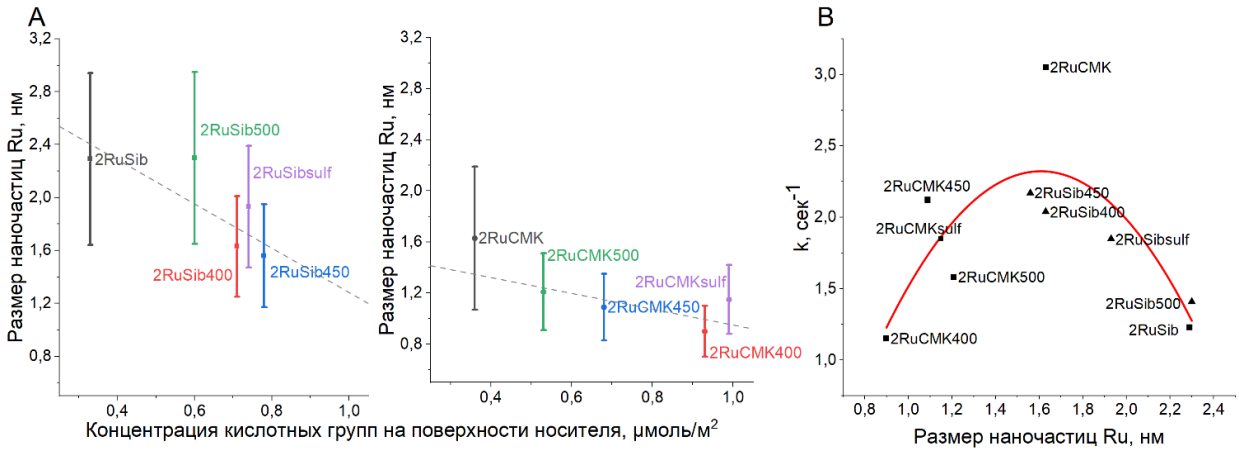


Рис. 1. А) Влияние кислотных групп на размер частиц Ru; Б) Зависимость константы скорости гидрирования глюкозы от среднего размера частиц рутения

Исследования нанесённых рутениевых катализаторов на мезопористом мезоструктурированном силикате SBA-15, модифицированном оксидами Zr и Nb [2, 3], показали их высокую эффективность в гидрировании ксилозы уже при 70°C. Катализаторы имеют сложную структуру: упорядоченные поры типа SBA-15, сложенные стенками оксида кремния, допированого оксидом циркония, тонкие плёнки оксида ниобия и суб- и наночастицы сложного состава Ru, RuO_2, RuO_3. Методом рентгеновской порошковой дифракции в малоугловой области оценён размер наночастиц рутения в порах катализатора 2Ru/10Nb/Zr-SBA-15, который составляет 0,85–1,15 нм (Рис. 2).

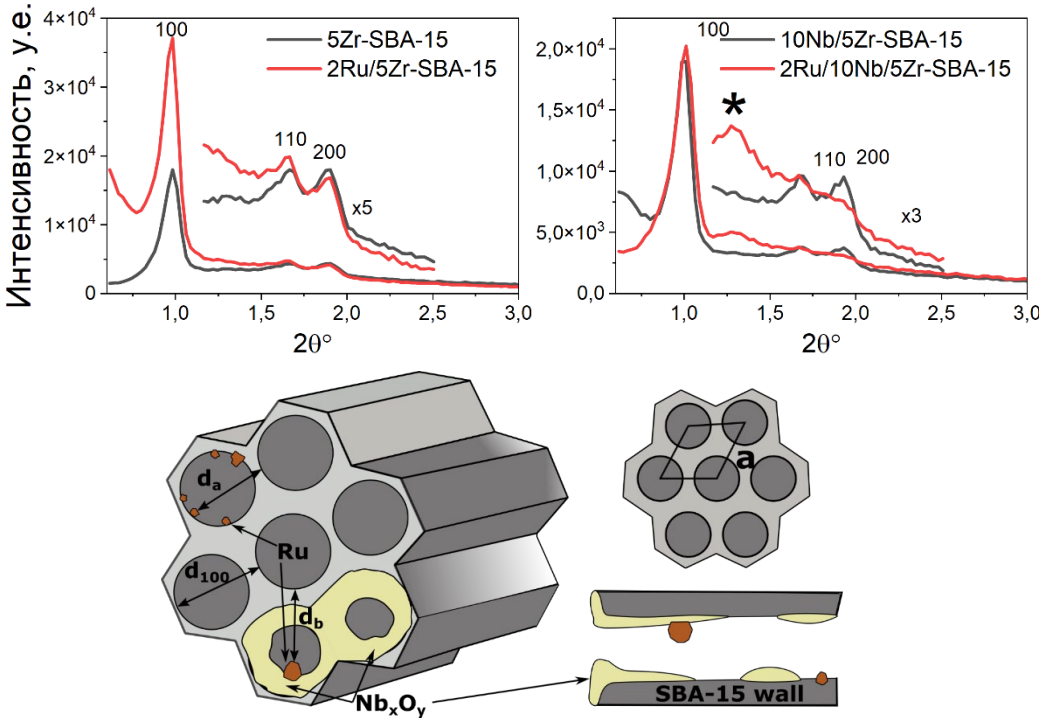


Рис. 2. Дифрактограммы носителей и катализаторо в малоугловой области и схематическое изображение структуры 2Ru/10Nb/5Zr-SBA-15

Разработанные рутениевые катализаторы превосходят или все известные аналоги, или соответствуют по активности другим лучшим результатам. Высокая каталитическая активность, позволяющая перейти от 180°C в гидрировании глюкозы к 60°C, вероятно связана с особенностями структуры нанесённых частиц: взаимодействием в одной частице рутения в металлической и оксидных формах и сильным взаимодействием активного компонента и носителя. Для дальнейшего развития дизайна катализаторов требуются исследования методами EXAFS и XANES с использованием синхротронного излучения.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (проект №FWES-2021-0012).

Литература:

[1] Zaitseva Yu.N., Eremina A.O., Sychev V.V., Golubkov V.A., Novikova S.A., Taran O.P., Kirik S.D. // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2024. Vol. 69, No. 4. P. 486-494.
[2] Голубков В.А., Зайцева Ю.Н., Кирик С.Д., Еремина А.О., Сычев В.В., Таран О.П. // Химия растительного сырья. 2023. № 4. С. 397-405.
[3] Golubkov V.A., Zaitseva Yu.N., Sychev V.V., Eremina A.O., Kirik S.D., Novikova S.A., Litvintseva K.A., Taran O.P. // Journal of Siberian Federal University. Chemistry. 2024. Vol. 17. No. 4. P. 528-538.

УДм-09

Изучение эффекта адсорбционно-индуцированной сегрегации под воздействием метана как инструмента контроля состава поверхности Pd-Ag/α-Al_2O_3 катализаторов методом РФЭС

Седельников Н.С.[1], Четырин И.А.[1,2], Бухтияров А.В.[1,2]
1 – ЦКП «СКИФ», Кольцово, Россия
2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
n.s.sedelnikov@srf-skif.ru

В настоящее время перспективным направлением для исследования в гетерогенном катализе являются биметаллические катализаторы. В частности, Pd-Ag катализаторы нашли применение во множестве промышленно значимых реакций: гидрирование алкинов, окисление CO, разложение муравьиной кислоты с образованием водорода и т.д. [1, 2, 3]. Добавление второго металла приводит к большей активности и/или селективности, в сравнении с монометаллическими аналогами, что обусловлено множеством факторов, в том числе синергическим эффектом. Однако причины возникновения синергического эффекта до конца неясны. Для более детального изучения влияния синергического эффекта используются современные поверхностно-чувствительные методы исследования, например рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, позволяющая установить как химический состав, так и зарядовые состояния элементов на поверхности.

Известно, что воздействие газовой среды способно оказывать влияние на структуру каталитических центров и распределение компонентов на поверхности. В частности, одним из инструментов тонкой настройки поверхности является использование различных газов-адсорбатов для адсорбционно-индуцированной сегрегации. Например, в литературе рассматривается применимость CO-индуцированной сегрегации атомов палладия для настройки поверхности Pd-Ag наночастиц, о чём свидетельствует рост отношения Pd/Ag при ступенчатом прогреве образца [4]. Однако вследствие токсичности CO и его высокой стоимости перспективным является возможность использования других газов-адсорбатов, например метана как менее токсичного и более дешёвого аналога. Возможность использования CH_4-индуцированной сегрегации для обогащения поверхности Cu-Ni/ZrO_2 атомами Ni продемонстрирована в работе [5].

В настоящей работе проводилось исследование CH_4-индуцированной сегрегации атомов палладия на поверхность Pd-Ag наночастиц с различным исходным соотношением Pd/Ag (1:10, 1:3, 3:1) на α-Al_2O_3. Перед началом эксперимента каждый из образцов отжигался в 200 мбар кислорода при температуре 350°C в течение часа для удаления различных углеродных отложений с поверхности и далее восстанавливался в 50 мбар водорода при температуре 500°C в течение часа. Все обработки катализаторов в газовой среде проводились в специальной ячейке высокого давления рентгеновского фотоэлектронного спектрометра SPECS (Германия). Для записи РФЭ-спектров после каждой обработки в газовой среде образцы перемещались в камеру анализатора без промежуточного контакта с воздухом. Все измерения проводились с использованием полусферического анализатора PHOIBOS-150-MCD

и источника немонохроматического рентгеновского излучения XR-50 на излучении AlKα (hv= 1486.6 эВ). На первом этапе эксперимента образец с наибольшим содержанием палладия ступенчато прогревался в 300 мбар метана до температуры 450 °C. При прогреве в метане наблюдалась сегрегация атомов палладия на поверхность уже при комнатной температуре вплоть до 350 °C, при более высоких температурах наблюдалось обратное формирование сплава, что следует из уменьшения отношения Pd/Ag. Для установления динамики CH_4-индуцированной сегрегации образец с соотношением Pd:Ag=3:1 обрабатывался в 300 мбар метана при температуре 200°C с различными временными интервалами (10–180 минут). Было установлено, что при обработках дольше 60 минут, атомное отношение Pd/Ag практически не менялось. На втором этапе эксперимента проводилась обработка образца Pd:Ag=1:3 в 300 мбар метана, по процедуре аналогичной для Pd:Ag=3:1. Согласно полученным данным сегрегация атомов палладия наблюдалась при прогреве от 200 до 350 °C, но при дальнейшем прогреве до 450 °C отношение Pd/Ag возвращалось к значениям близким к исходному. На третьем этапе эксперимента обрабатывался образец с соотношением Pd:Ag=1:10, аналогично двум предыдущем. Сегрегация палладия наблюдалась при обработке метаном в температурном диапазоне от 150 до 300 °C. При прогреве выше 300°C отношение Pd/Ag постепенно возвращалось к значению сопоставимому с исходным.

Согласно полученным данным CH_4-индуцированная сегрегация атомов палладия на поверхность Pd-Ag наночастиц наблюдалась для образцов с различным исходным отношением Pd/Ag. Следовательно, CH_4-индуцированная сегрегация может использоваться для тонкой настройки поверхности биметаллических катализаторов для низкотемпературных реакций.

Благодарности: Работа была выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] McGown W., Kemball C., Whan D. A. // Hydrogenation of acetylene in excess ethylene on an alumina-supported palladium catalyst at atmospheric pressure in a spinning basket reactor // Journal of Catalysis. 1978. V. 51. № 2. P. 173-184.

[2] M. A. Panafidin, A. V. Bukhtiyarov, I. P. Prosvirin, Y.V. Zubavichus, V. I. Bukhtiyarov. // Adaptivity of depth distribution of two metals in Pd-Ag/HOPG catalyst to external conditions in the course of mild CO oxidation. // Surfaces and Interfaces 2023. V. 41 P. 103255.

[3] Huang L., Yang J., Wu M., Shi Z., Lin Z., Kang X., Chen S. // PdAg@Pd core-shell nanotubes: Superior catalytic performance towards electrochemical oxidation of formic acid and methanol // Journal of Power Sources. 2018. V. 398. P. 201-208.

[4] Pavel V. Markov, Nadezhda S. Smirnova, Galina N. Baeva, Igor S. Mashkovsky, Andrey V. Bukhtiyarov, Igor A. Chetyrin, Yan V. Zubavichus and Alexander Yu. Stakheev. // Single-atom alloy Pd1Ag10/Al2O3 catalyst: effect of CO-induced Pd surface segregation on the structure and catalytic performance in the hydrogenation of C2H2 // Mendeleev Commun. 2023. V. 33. P. 812–814

[5] Astrid Wolfbeisser, Gábor Kovács, Sergey M. Kozlov, Karin Föttinger, Johannes Bernardi, Bernhard Klötzer, Konstantin M. Neyman, Günther Rupprechter // Surface composition changes of CuNi-ZrO2 during methane decomposition: An operando NAP-XPS and density functional study. // Catalysis Today. 2017. № 6 V.283. P.134–143.

УДм-10

Синхротронные исследования биосовместимых наночастиц пористого кремния

Титова С.С.[1], Цурикова У.А.[2], Осминкина Л.А.[2], Чумаков Р.Г.[3], Лебедев А.М.[3], Канныкин С.В.[1], Беликов Е.А.[1], Синельников А.А.[1], Какулия Ю.С.[1], Сальков С.И.[1], Паринова Е.В.[1], Чувенкова О.А.[1], Турищев С.Ю.[1]

1 –Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

2 –Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

3 –Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия

titova@phys.vsu.ru

Наночастицы пористого кремния (PSi NPs) обладают свойствами, которые позволяют использовать их в биомедицине. Такие свойства как биодеградация, биосовместимость, биодоступность позволяют совмещать PSi NPs с природоподобными структурами. Благодаря таким свойствам, как сенсибилизация и люминесценция наночастицы пористого кремния могут быть применены в областях тераностики и биомедицины, для лечения различных заболеваний, маркирования клеток. Возможность совмещения PSi NPs с клеточными культурами млекопитающих, как частный случай получения биогибридных систем, вызывает большой исследовательский интерес в научном сообществе. Совокупность свойств функциональных PSi NPs зависит от способов их получения и параметров исходных пластин кремния. Возможность вариации методов получения делает кремниевые порошки удобным объектом для подбора условий интеграции с природными объектами, в том числе с клетками. В виду потенциальной возможности использовать PSi NPs в биомедицине актуально подобрать оптимальные условия и способы их получения.

Использование прямых экспериментальных методов изучения функциональных материалов, в том числе биогибридных безусловно востребовано. Синхротронный метод XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure, спектроскопия ближней тонкой структуры края поглощения рентгеновских лучей) позволяет получать информацию о физико-химическом состоянии, составе, структуре, атомном и электронном строении наноразмерных объектов, обладающих чрезвычайно развитой поверхностью. Лабораторные методы электронной микроскопии и дифракции рентгеновский лучей безусловно востребованы при изучении функциональных материалов и отлично дополняют друг друга.

В данной работе были исследованы наночастицы пористого кремния, полученные различными способами высушивания. В качестве исходного материала для получения PSi NPs были взяты пластины кристаллического кремния c-Si (100). Затем, методом электрохимического травления в растворе плавиковой кислоты были получены пленки пористого кремния. Пленки пористого кремния были размолоты в планетарной мельнице. В результате измельчения была получена водная суспензия PSi NPs, которая была использована для получения порошков.

Для исследования влияния способа получения на свойства наночастиц пористого кремния были выбраны два различных метода высушивания исходной суспензии. Первый способ - термическое высушивание в сушильном шкафу, полученный образец - порошок AD-PSi NPs (air

drying). Второй порошок был высушен лиофильным способом, в результате чего был получен образец FD-PSi NPs (freeze drying).

Для получения спектров XANES использовалось высокоинтенсивное излучение установки класса "мегасайенс" синхротрона "КИСИ-Курчатов" НИЦ "Курчатовский институт" (станция НаноФЭС), что позволило варьировать энергию квантов рентгеновского излучения без потерь в интенсивности.

По данным растровой и просвечивающей электронной микроскопии, рентгеновской дифракции показаны и проанализированы отличия в размере наночастиц, их агломерации. Тонкая структура спектров XANES указывает на почти полное окисление в случае AD-PSi NPs. В случае FD-PSi NPs показано присутствие атомов кремния в наночастицах, не подверженных окислению. Таким образом лиофильное высушивание предотвращает окисление PSi NPs, по крайней мере в пределах глубины информативного слоя использованного метода (~ 5 нм). Такой результат говорит о влиянии способа высушивания на свойства развитой поверхности наночастиц, их стабильность, в том числе при длительном хранении, а также на дальнейшее взаимодействие PSi NPs с биологическими объектами.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №25-12-00413 и поддержано Министерством науки и высшего образования РФ в рамках соглашения N 075-15-2025-455 в части методических вопросов синхротронных исследований.

УДм-11

Модельные биметаллические Rh-In/ВОПГ катализаторы: приготовление, РФЭС и СТМ исследование

Мартьянов А.О.[1], Панафидин М.А.[1], Бухтияров А.В.[1], Просвирин И.П.[2], Зубавичус Я.В.[1], Бухтияров В.И.[2]

1 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия

2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

a.martyanov1@g.nsu.ru

В настоящее время биметаллические катализаторы находятся в центре внимания исследователей в области гетерогенного катализа. Это связано с тем, что они зачастую характеризуются большей активностью и/или селективностью по сравнению с монометаллическими аналогами. Так, например, биметаллические катализаторы на основе родия нашли широкое применение в целом ряде реакций: аминирование спиртов [1], синтез метанола [2], гидрирование пропилена и др. Ключевыми факторами, влияющими на возникновение синергического эффекта, является взаимное распределение металлов внутри биметаллической наночастицы и их размер. Несмотря на это причины возникновения синергического эффекта для различных биметаллических катализаторов варьируются в зависимости от конкретной каталитической системы (катализатор + реакция). Исследование модельных систем, где наночастицы активного компонента нанесены на планарный проводящий носитель (например, на высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ)), с использованием поверхностно-чувствительных физико-химических методов исследования в режимах in situ и operando может значительно повысить информативность данных о возможных причинах возникновения синергических эффектов [3].

Исходный химический состав, а также структура поверхности биметаллического катализатора задается на этапе приготовления. Несмотря на это, она может меняться непосредственно в ходе протекания реакции, а также в результате проведения предварительных обработок в различных газовых средах. Явление, при котором происходит перераспределение металлов с выходом одного из металлов на поверхность биметаллических наночастиц носит название адсорбционно-индуцированной сегрегации. Данный эффект может быть использован для постсинтетической настройки поверхности с формированием активных центров необходимых для конкретной реакции [4]. Адсорбционно-индуцируемая сегрегация практически не изучена для Rh-In систем, но может быть использована для избирательного формирования активных центров нужного типа. Исследование эффекта адсорбционно-индуцированной сегрегации для модельных биметаллических Rh-In/ВОПГ катализаторов позволит целенаправленно изменять структуру и состав поверхности наночастиц, и, как следствие, управлять их каталитическими свойствами.

Методом последовательного термического вакуумного напыления была приготовлена серия моно- и биметаллических Rh/ВОПГ In/ВОПГ Rh-In/ВОПГ катализаторов с заданными характеристиками. На каждом этапе приготовления образцы были охарактеризованы

методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и сканирующей туннельной микроскопии (СТМ).

В работе проведено исследование закономерностей формирования биметаллических Rh-In наночастиц. Установлено, что напыление индия на заранее приготовленную монометаллическую Rh/ВОПГ матрицу приводит к образованию биметаллических Rh-In наночастиц. В результате прогрева образца в условиях сверхвысокого вакуума при 350°C происходит перераспределение активного компонента в объеме наночастицы, приводя к более равномерному распределению металлов по объему. Установлены химический состав, структура, а также термическая стабильность приготовленных биметаллических Rh-In наночастиц. Показано, что под действием кислорода в диапазоне температур 25-150°C происходит сегрегация атомов индия на поверхность биметаллических наночастиц. Последующий ступенчатый прогрев до 350°C в условиях сверхвысокого вакуума ведет к диффузии атомов индия в объем наночастиц, возвращая систему в исходное состояние, соответствующее прогреву образца в вакууме при температуре 350°C, что свидетельствует об обратимости процесса адсорбционно-индуцированной сегрегации.

Для исходной структуры биметаллического катализатора выполнены теоретические расчеты, основанные на экспериментальных данных, полученных методами РФЭС И СТМ. Было установлено, что равномерное распределение металлов внутри биметаллической наночастицы хорошо согласуется с экспериментальным значением атомного отношения Rh/In при температуре 350°C в условиях сверхвысокого вакуума.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0032).

Литература:

[1] Takanashi T., Tamura M., Nakagawa Y., Tomishige K. Structure of catalytically active Rh–In bimetallic phase for amination of alcohols // RSC Adv. – 2014. – V. 4. – № 54. – P. 28664.

[2] Li M.M., Zou H., Zheng J., Wu T., Chan T., Soo Y., Wu X., Gong X., Chen T., Roy K., Held G., Tsang S.C.E. Methanol Synthesis at a Wide Range of H 2 /CO 2 Ratios over a Rh-In Bimetallic Catalyst // Angew. Chemie Int. Ed. – 2020. – V. 59. – № 37. – P. 16039–16046.

[3] Bukhtiyarov A. V., Burueva D.B., Prosvirin I.P., Klyushin A.Y., Panafidin M.A., Kovtunov K. V., Bukhtiyarov V.I., Koptyug I. V. Bimetallic Pd–Au/Highly Oriented Pyrolytic Graphite Catalysts: from Composition to Pairwise Parahydrogen Addition Selectivity // J. Phys. Chem. C. – 2018. – V. 122. – № 32. – P. 18588–18595.

[4] McCue A.J., Anderson J.A. CO induced surface segregation as a means of improving surface composition and enhancing performance of CuPd bimetallic catalysts // J. Catal. – 2015. – V. 329. – P. 538–546.

УДм-12

Применение синхротронного излучения для исследования динамики фазообразования структур алюмината кальция

Токарев Д.С.[1], Мостовщиков А.В.[1,2], Сыртанов М.С.[1], Шарафутдинов М.Р.[3]
1 – Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
2 – Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, Россия
3 – ЦКП «СКИФ», Новосибирск, Россия
dst13@tpu.ru

Алюминаты кальция, широко применяемые в строительной отрасли (в составе портландцемента [1], алюмосиликатных цементов [2]) и люминесценции (матрицы различных люминофоров [3, 4]), несомненно, представляют значительный интерес.

Реализация технологии твердофазного синтеза алюминатов с применением нанопорошков алюминия, а также термодинамически нестабильных модификаций оксида алюминия может представлять существенный интерес за счет положительного эффекта, оказываемого данными материалами. Для обоснования выдвинутой гипотезы выполнен рентгенофазовый анализ методом in situ с применением синхротронного излучения. Широкий диапазон углов 2θ позволяет захватывать большинство рефлексов образуемых в ходе синтеза фаз, а высокая интенсивность излучения позволяет свести к минимуму время набора спектра.

В работе рассмотрены процессы фазообразования алюминатов кальция в системах CaO–Alнп, CaO–Alмк и CaO–γ-Al_2O_3. В качестве прекурсоров для формирования исходных смесей использовались микронный порошок $Ca(OH)_2$, микронные порошки γ-Al_2O_3 и Al, а также наноразмерный порошок Al. Целевым продуктом исследования была выбрана фаза алюмината кальция $CaAl_4O_7$. Параметры эксперимента представлены в таблице 1.

Таб.1. Параметры эксперимента in situ

Параметр	Значение
Длина волны синхротронного излучения	1,5 Å
Диапазон нагрева	25-1350℃
Скорость нагрева	30℃/мин
Время съемки шага	30 с
Изменение температуры шага	15℃

По результатам работы получена серия дифрактограмм для каждой системы. Обработка данных позволила установить основные температурные границы фазообразования структур алюминатов, которые приведены в таблице 2.

Анализируя динамику фазообразования в исследуемых системах, можно установить ключевые различия:

– образование при 1190℃ в системе CaO–γ-Al_2O_3 фазы $Ca_3Al_2O_6$, тогда как в системах CaO–Alнп и CaO–Alмк данная фаза не образуется;

– явное повышение температуры фазообразования $CaAl_2O_4$ (1205℃) в системе CaO–γ-Al_2O_3, в сравнении с системами CaO–Alнп (1150℃) и CaO–Alмк (1185℃);

– в рассматриваемой температурной области эксперимента 25-1350 при скорости нагрева заданного значения 15℃/мин в системе CaO–γ-Al_2O_3 не успевает образоваться фазовая структура $CaAl_4O_7$, в то время как в системах CaO–Alнп и CaO–Alмк при эквивалентных параметрах нагрева данная фазовая структура формируется.

Таб.2. Температуры фазообразования в исследуемых системах

Фаза/Система	CaO–Alнп	CaO–Alмк	CaO–γ-Al2O3
$Ca_3Al_2O_6$	–	–	1190℃
$CaAl_2O_4$	1150℃	1185℃	1205℃
$CaAl_4O_7$	1330℃	1215℃	–

Результаты работы в части оценки изменения интенсивности рефлексов позволили установить, что фазообразование $CaAl_4O_7$ в системе CaO–γ-Al_2O_3 происходит через промежуточные фазы $Ca_3Al_2O_6$ и $CaAl_2O_4$, в то время как в системе CaO–Alнп фазообразование $CaAl_4O_7$ происходит преимущественно через фазу $CaA_{l2}O_4$, а в системе CaO–Alмк фаза CaAl4O7 формируется параллельно с фазой $CaAl_2O_4$.

Данные различия в динамике фазообразования в рассматриваемых системах обусловлены структурными и физическими характеристиками частиц исходного состава образцов. В то время как в системе CaO–Alнп наноразмерные частицы Al изначально «обволакивают» поверхность микронных частицы $Ca(OH)_2$ за счет различия размерности частиц в несколько порядков, а в системе CaO–Alмк расплав Al вытекая в следствии разрушения оксидной оболочки «обволакивает» частицы образованного CaO и окисляется в атмосфере воздуха при высоких температурах, в системе CaO–γ-Al_2O_3 контактная площадь границы CaO-Al_2O_3 не претерпевает существенных изменений и ограничивается зонами соприкосновения микронных частиц Al_2O_3 и CaO. Такое различие приводит к заметному снижению темпов диффузии ионов Al^{3+} в структуру CaO, что в свою очередь провоцирует образование фазовой структуры $Ca_3Al_2O_6$ при температуре 1190℃, содержащую наименьшую долю алюминия среди всех фаз алюминатов кальция.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2023-0003).

Литература:

[1] López F. A. et al. Synthesis of calcium aluminates from non-saline aluminum dross //Materials. – 2019. – Т. 12. – №. 11. – С. 1837.

[2] Baloch W. L. et al. An overview of practical challenges and current advances related to the use of calcium aluminate cement in various concrete applications //Journal of Building Engineering. – 2025. – С. 112015.

[3] Pawade V. B., Swart H. C., Dhoble S. J. Review of rare earth activated blue emission phosphors prepared by combustion synthesis //Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2015. – Т. 52. – С. 596-612.

[4] Panda R. et al. Development of thermally stable, single-phased CaAl4O7: Dy3+ phosphor and a study on their down-conversion features for lighting applications //Advanced Powder Technology. – 2024. – Т. 35. – №. 11. – С. 104672.

УДм-13

Программная библиотека *DIFS* для расчета и оптимизации стратегий рентгенодифракционных монокристальных экспериментов

Улыбин Д.А.[1,2,3]
1 – ЦКП "СКИФ", Кольцово, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
3 – Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия
d.a.ulybin@mail.ru

Дифрактометрический анализ монокристаллов является наиболее распространенным методом определения атомной структуры кристаллических веществ. Одним из основных этапов дифракционного эксперимента является составление стратегии эксперимента (***СЭ***). *СЭ* в рамках данного метода называют совокупность набора вращений кристалла (в общем – случае более сложной пробы), экспозиции и расположения основных узлов дифрактометрической системы: осей гониометра, положения детектора, наличия и конфигурации «затеняющих» элементов. Существуют программные модули для расчета *СЭ*, часто входящие в состав коммерческого ПО, поставляемого с дифрактометрами, как `APEX3` (Bruker AXS Inc., 2019) и `CrysAlisPro` (Agilent Technologies Ltd, 2014). Существенным недостатком упомянутых программ является их изначальная ориентация на конкретные дифрактометрические системы. В сочетании с проприетарной моделью распространения это исключает возможность адаптации данных программ для работы с дифрактометрами, не предусмотренными компаниями. Появление новых дифрактометрических систем, в том числе на станциях синхротронного излучения, указывает на необходимость разработки специализированного программного обеспечения для расчета *СЭ*. Это связано с тем, что в условиях синхротронного эксперимента особенно остро стоит необходимость быстрого анализа и коррекции из-за строгой ограниченности времени и большого объема получаемых данных. Разрабатываемое программное обеспечение должно обладать гибкой настройкой приборной модели и быть адаптированным под большинство существующих дифрактометрических систем. Кроме того, оно должно предоставлять возможность дополнения специализированными программными модулями, учитывают особенности применяемых методик, для *in situ* анализа получаемых данных и корректировки *СЭ*.

Программная библиотека `DIFS` разработана для расчета, анализа и оптимизации *СЭ* рентгеновской дифракции, ключевой особенностью разработки является гибкая настройка, позволяющая адаптировать расчеты для большинства дифрактометрических систем. Проведено сравнение экспериментально достигнутой полноты данных (***ПД$_{эксп}$***) с полнотой, предсказанной библиотекой `DIFS` (***ПД$_{расч}$***) для двух лабораторных дифрактометров: Bruker D8 Venture (180° ω-сканирование, ***$V_{эя}$*** – объем элементарной ячейки образца – 3.280 Å^3, λ=MoKα$_{1,2}$), Tongda TD-5000 (180° ω-сканирование, *$V_{эя}$* 991 Å^3, λ=MoKα$_{1,2}$), см. таблицу.

Для прибора D8 Venture расчет и эксперимент достаточно хорошо сходятся, в тоже время для TD-5000 есть заметное отклонение. Анализ несовпадения экспериментальных и предсказанных данных показал, что расхождения является следствием неточности приборной

Таблица. Сравнение характеристик полноты для эксперимента и рассчитанной стратегии.

Прибор	$ПД_{эксп}$, %	$ПД_{расч}$, %	$\Delta П$, %	кол-во совпадающих рефлексов
D8 Venture	99.3	99.4	0.1	21115
TD-5000	85.9	89.1	3.2	4620

модели данного дифрактометра (в первую очередь – реальным относительным расположением осей дифрактометра, значение которых усиливаются при использовании координатного детектора с большим количеством межмодульных зазоров).

Библиотека также обладает инструментарием для реализации различных затеняющих элементов установки, в частности – заглушек первичного пучка. Так, с помощью библиотеки был проведен расчет четырех *СЭ* для экспериментов с χ-переориентируемой алмазной наковальней для дифракционного класса $\bar{1}$. Сравнение полученных *СЭ* показало, что наиболее оптимальной по соотношению полноты данных и времени эксперимента является *СЭ*, состоящая из двух сканирований (см. рисунок).

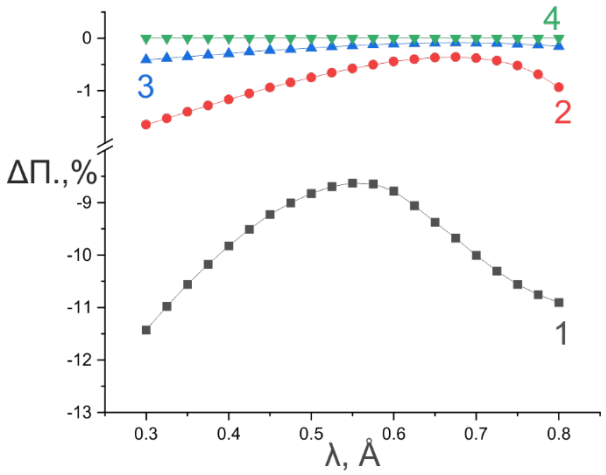


Рисунок. График потери полноты сбора данных относительно эксперимента с четырьмя сканировании. 1,2,3,4 – количество разных сканирований в СЭ.

На данный момент библиотека `DIFS` обладает возможностью адаптации под используемые дифрактометрические системы, позволяя настраивать: длину волны, детектор (одно и мультимодульные), оси гониометра (в том числе подстроечные и коррекционные), наличие затеняющих препятствий (неподвижные относительно любой из осей прибора). В развитие текущего функционала библиотеки планируется разработка модуля первичной обработки дифракционных данных. Этот модуль предназначен для расчета оптимальной стратегии эксперимента с учетом таких факторов, как динамический диапазон используемого детектора, экспозиция, скорость сканирования и рентгеновская деградация образца, что особенно актуально на станциях монокристальной дифракции синхротронного излучения.

Благодарности: Работа частично выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП "СКИФ" Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0040) и частичной поддержке Программы «Приоритет-2030», проект «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий», НГУ. Автор благодарен к.г-.м.н Ращенко С.В. (ИГМ СО РАН), к.ф.-м.н. Довженко Г.Д. (ЦКП “СКИФ”), к.х.н (ИНХ СО РАН) Комарову В.Ю. за обсуждение функционала программы.

УДм-14

Формирование, морфология и состав, атомное и электронное строение нитевидных кристаллов диоксида олова

Фатеев К.А.[1], Чувенкова О.А.[1], Рябцев С.В.[1], Чумаков Р.Г.[2], Шрамков Е.А.[2], Пелагина А.К.[1], Занин И.Е.[1], Турищев С.Ю.[1]

1 – Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

2 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

fateev@phys.vsu.ru

Наноструктурированные материалы на основе оксида олова SnO_2 являются актуальными для исследования в настоящее время. Это связано с газочувствительными свойствами таких объектов, а также возможностью создания высокоточных приборов на их основе. Особенно интересны нитевидные кристаллы диоксида олова в связи с высоким соотношением поверхности к объему. Знание о влиянии условий формирования на локальное атомное окружение, состав, структуру и физико-химическое состояние в целом нитевидных кристаллов, в первую очередь развитой поверхности этих объектов позволят управлять свойствами этого функционального материала, в том числе для применения на практике.

В ходе работы были сформированы нитевидные кристаллы диоксида олова SnO_2 методом газотранспортного синтеза при одинаковых условиях формирования, помимо температуры, которая отличалось на ~ 100°C в камере роста. Данные образцы были исследованы методами сканирующей (растровой) электронной микроскопии (SEM – Scanning Electron Microscopy) и рентгеновской дифракции (XRD – X-ray diffraction) на базе ЦКПНО ВГУ, Воронеж. Исследования поверхности проводились методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS – X-ray photoelectron spectroscopy) и спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES – X-ray absorption near edge structure), с использованием источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов», НИЦ «Курчатовский институт» Москва (станция НАНОФЭС), также были привлечены данные полученные ранее, в Гельмгольц Центре Берлин (синхротрон BESSY II, станция RGBL).

Показано существенное различие морфологии и размера нитевидных кристаллов, сформированных при различной температуре. Полученные при помощи энерго-дисперсионной приставки, спектры рентгеновской флуоресценции показали «чистоту» формирования объектов. Рентгено-дифракционный анализ показал формирование кристаллического SnO_2 тетрагональной модификации в «объеме» материала, а также сильное текстурирование для объектов, полученных при повышенной температуре. Синхротронные спектры XANES показали существенное влияние размеров, формируемых кристаллов, на электронно-энергетический спектр. Недостаток атомов кислорода в слоях развитой поверхности нитевидных кристаллов приводит к образованию препика в синхротронных спектрах XANES, соответствующего состояниям в запрещённой зоне диоксида олова. Форма и относительная интенсивность данного препика изменяется, в зависимости от температуры синтеза, следовательно, от изменения вклада развитой поверхности в электронно-энергетический спектр, обусловленной существенно различной морфологией и размером.

Форма края поглощения позволяет говорить о формировании тетрагонального SnO_2 на поверхности исследуемых объектов, что находится в согласии с XRD данными. XPS спектры также позволяют заключить, что существует недостаток кислорода, приводящий к формированию SnO_{2-x} в поверхностном слое исследуемых объектов. Вариации условий формирования нитевидных кристаллов оксида олова могут позволить управлять их атомным и электронным строением, физико-химическим состоянием для современных электронных устройств.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2025-455.

УДм-15

Оптимизация и применение алгоритмов восстановления фазы в методе CDI

Мурзина А.В.[1], Виноградов А.В.[2], Попов Н.Л.[2]
1 – Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
2 – Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
murzina.anastasiia@yandex.ru

Методы безлинзовой микроскопии, в частности компьютерные методы восстановления фазы, претерпели стремительное развитие с усовершенствованием доступных вычислительных ресурсов. Одним из основных методов восстановления фазы является метод когерентного дифракционного имаджинга (Coherent Diffraction Imaging, CDI), который находит свое применение в широком спектре научных задач, таких, как материаловедение и науки о жизни [1]. За счёт исключения оптических аберраций CDI даёт возможность по зарегистрированной дифракционной картине некристаллического объекта одновременно реконструировать амплитуду и фазу рассеянного поля, обеспечивая тем самым пространственное разрешение, ограниченное длиной волны и разрешающей способностью детектора.

Практическая реализация методов CDI нередко сталкивается с рядом технологических и методологических ограничений. Так, стандартная постановка задачи подразумевает расположение детектора в зоне Фраунгофера, и основой алгоритмов становится преобразование Фурье, характеризующее излучение в дальней зоне [2]. В эксперименте с расположением детектора в ближней зоне требуется учет волнового пропагатора, что, фактически, влечет за собой удвоение числа преобразований Фурье на каждую итерацию [3]. Дополнительные ограничения в процессе восстановления изображения исследуемого объекта создают отсутствие априорной информации о точном размере домена объекта и частичная когерентность источника.

В настоящей работе представлен ряд алгоритмических модификаций, увеличивающих скорость вычислений и повышающих эффективность реконструкции изображения объекта в вышеописанных условиях без увеличения объёма и сложности вычислений. Работоспособность разработанного подхода была продемонстрирована в экспериментальной установке с использованием гелий-неонового лазера в качестве источника когерентного излучения.

Литература:

[1] Miao J. //Nature. 2025. Т. 637. №. 8045. С. 281-295.
[2] Fienup J. R. //Applied optics. 1982. Т. 21. №. 15. С. 2758-2769.
[3] Артюков И. А. и др. //Краткие сообщения по физике Физического института им. ПН Лебедева Российской Академии Наук. 2023. Т. 50. №. 10. С. 11-19.

УДм-16

Исследование пространственных структур нетранслируемых регионов РНК генома Kindia tick virus методом малоуглового рентгеновского рассеяния и разработка технологической платформы для их кристаллизации

Радченко Д.А., Гладышева А.В.
Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии «Вектор» Роспотребнадзора, р.п. Кольцово, Россия
darya.a.00@yandex.ru

Вирусы опасные патогены человека, которые имеют различные механизмы, позволяющие им конкурировать с клеточными мРНК. Важную роль для репликации вируса играют нетранслируемые регионы (UTR) их генома. Они сворачиваются в определённую структуру и действуют как цис-элементы для транскрипции, трансляции и упаковки вирусного генома. Зная структуру UTR РНК, можно разрабатывать препараты, направленные на различные этапы жизненного цикла вирусов. Однако получение пространственной структуры РНК является сложной и трудоемкой задачей вследствие ее подвижности и нестабильности в растворе.

Kindia tick virus (KITV) - вирус группы Jingmenvirus семейства *Flaviviridae*, обнаруженный в иксодовых клещах. В отличие от классических вирусов семейства *Flaviviridae*, геном KITV состоит из 4 сегментов, каждый из которых фланкирован 5′ и 3′ UTR. Эти регионы играют важную роль во всех этапах жизненного цикла вируса, формируя функциональные вторичные структуры. Ранее проведенное компьютерное моделирование вторичной структуры 5′ и 3′ UTR РНК KITV выявило регуляторные элементы характерные для рода *Orthoflavivirus* [1], что указывает на их эволюционную и функциональную значимость. Изучение пространственной структуры 5′ и 3′ UTR KITV поможет раскрыть механизмы работы его генома и разработать методы борьбы с этим малоизученным вирусом.

Для исследования структуры 5′ и 3′ UTR РНК KITV методом ренгеноструктурного анализа была разработана методика совместной кристаллизации РНК с белком оболочки фага MS2 (белок MS2) основанная на технологии MS2-меченых последовательностей, применяемой для отслеживания РНК в живых клетках. Белок MS2 взаимодействует с петлеобразной структурой, формируемой определенным участком РНК протяженностью 18 нуклеотидов (MS2-тег). Данную последовательность интегрировали в молекулы РНК, обеспечивая при этом сохранность их нативной конформации. В результате чего было получено 26 генетических конструкций содержащих ДНК копии нативных и химерных (содержащих MS2-тег) вариантов 5′ и 3′ UTR РНК всех четырех сегментов KITV для двух изолятов KITV/2018/1 и KITV/2018/2. Далее получали РНК 5′ и 3′ UTR 1 и 3 сегментов KITV in vitro с помощью T7-полимеразы и отчищали. Для структурного анализа РНК на синхротронном источнике методом малоуглового рентгеновского рассеяния образцы должны соответствовать строгим критериям: чистота не ниже 95%, преобладание целевой формы молекулы и концентрация не менее 1 мг/мл. Данным условиям соответствовало 10 образцов РНК-транскриптов 5′ и 3′ UTR 1 и 3 сегментов KITV и с них были получены экспериментальные кривые малоуглового рассеяния на станции

BL19U2 Шанхайского центра синхротронного излучения, по которым были рассчитаны общие структурные параметры, такие как молекулярная масса и радиус инерции. Численные показатели теоретически посчитанных молекулярных масс укладываются в интервал экспериментальных молекулярных масс, получаемых различными вычислительными способами, что принципиально важно для дальнейшей оптимизации методик для подготовки РНК к со-кристаллизации с модельным белком оболочки фага MS2 и белками KITV. Радиус инерции свидетельствует о том, что биомолекулы химерных и нативных 5’ и 3’ UTR РНК KITV формируют в растворе компактные упорядоченные структуры. Введение MS2-tag в структуру 5’ и 3’ UTR РНК KITV не влияет на изменение радиуса инерции биомолекул в растворе. Кроме того, измеренный размер биомолекул химерных и нативных 5’ и 3’ UTR РНК KITV напрямую коррелирует с длиной нуклеотидных последовательностей и молекулярными массами 5’ и 3’ UTR РНК KITV.

Для трех пар нативных и химерных вариантов 5’ UTR РНК 1 сегмента KITV, 5’ и 3’ UTR РНК 3 сегмента изолята KITV/2018/1 были восстановлены пространственные структуры, которые демонстрируют схожую вытянутую, но компактную форму. При попарном наложении пространственных структур нативных вариантов с химерными UTR РНК KITV не выявлено значительных различий формы, что говорит об отсутствии влияния MS2-tag на структуру нативных 5’ и 3’ UTR РНК KITV. Это делает возможным использование системы «MS2-тегинга» для исследования структуры 5’ и 3’ UTR РНК KITV с использованием белка оболочки фага MS2 для со-кристаллизации комплексов белок-РНК в целях дальнейшего рентгеноструктурного анализа. Далее синтетические нативные РНК транскрипты 5’ и 3’ UTR РНК KITV будут использованы для поиска РНК-связывающих белков данного вируса. А химерные РНК транскрипты 5’ и 3’ UTR KITV в комплексе с белком оболочки фага MS2 будут кристаллизованы с последующим исследованием кристаллов методом рентгеноструктурного анализа на источнике синхротронного излучении. Это позволит экспериментально подтвердить структуру 5’ и 3’ UTR РНК KITV и установить роль нетранслируемых регионов вирусной РНК в реализации генетической информации новых флавиподобных вирусов с сегментированным геномом.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение от 30.05.2025 № 075-15-2025-452)

Литература:

[1] Tsishevskaya A.A, Alkhireenko D.A, Bayandin R.B, Kartashov M.Y, Ternovoi V.A, Gladysheva A.V. Untranslated Regions of a Segmented Kindia Tick Virus Genome Are Highly Conserved and Contain Multiple Regulatory Elements for Viral Replication // Microorganisms. 2024. V. 12(2). P. 239.

УДм-17

Исследование структуры нуклеопротеинов недавно обнаруженных вирусов (Beiji nairovirus и Songling virus) с помощью интеграции вычислительных и синхротронных методов

Яншин А.О.[1,2], Гладышева А.В.[1]
1 – Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии «Вектор» Роспотребнадзора, р. п. Кольцово, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
a.yanshin@g.nsu.ru

В последние годы современные методы секвенирования позволили идентифицировать новых представителей семейства Nairoviridae, в том числе Beiji nairovirus (BJNV) и Songling virus (SGLV), связанных с тяжелыми инфекционными заболеваниями человека и животных [1]. Центральную роль в жизненном цикле этих патогенов играют нуклеопротеины, которые связывают, защищают и инкапсулируют вирусный геном, формируя рибонуклеопротеиновые (RNP) комплексы, необходимые для транскрипции, репликации и предотвращения деградации РНК. На сегодняшний день, несмотря на значимость нуклеопротеинов BJNV и SGLV как потенциальных мишеней для противовирусной терапии, их пространственная структура оставалась неизученной, что затрудняет целенаправленную разработку вакцин и лекарственных средств [1]. Успехи в области искусственного интеллекта, в частности развитие нейросетевых методов структурного моделирования AlphaFold 3 [2], позволяют получить предсказания третичной структуры белков с высокой точностью. Комплексное использование инструментов синхротронной кристаллографии, малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и методов ИИ создает новые возможности для пространственного анализа нуклеопротеинов новых представителей Nairoviridae.

Целью исследования стало комплексное структурно-функциональное изучение нуклеопротеинов Beiji nairovirus и Songling virus с использованием вычислительных методов моделирования, экспериментов МУРР и рентгеноструктурного анализа с применением синхротронного излучения.

В результате впервые были построены модели третичных структур нуклеопротеинов SGLV и BJNV с помощью AlphaFold 3, выявлены особенности доменной организации и определены потенциальные РНК-связывающие участки. Установлено, что нуклеопротеины этих вирусов обладают двухдоменной структурой, при этом один домен является глобулярным, формируется α-спиралями и содержит обширный полярный карман, необходимый для стабильного связывания одноцепочечных фрагментов РНК вирусного генома, что потенциально обеспечивает специфичность и эффективность инкапсуляции, а второй домен важен для олигомеризации и отличается высокой конформационной гибкостью, что может определять специфику взаимодействия белка с геномной РНК и влиять на эффективность вирусной репликации [1]. Детальный анализ молекулярной поверхности выявил кластеры положительно заряженных остатков, совпадающие с предсказанными РНК-связывающими мотивами. Высокая консервативность этих участков среди гомологичных структур

подчёркивает их ключевую роль в связывании и упаковке вирусной РНК, а также указывает на перспективные мишени для разработки ингибиторов.

Гель-эксклюзионная хроматография и динамическое светорассеяние подтвердили, что нуклеопротеины находятся в мономерной форме при физиологических условиях, с размерами около 6,0±1,8 нм для SGLV и 8,5±2,1 нм для BJNV, что согласуется с модельными предсказаниями.

Для выявления пространственных параметров и верификации ИИ-моделей были применены методы малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и рентгеноструктурного анализа (РСА) с использованием синхротронного излучения. МУРР-эксперименты, проведённые на станции BL19U2 SSRF (Шанхай), позволили получить структурые параметры вирусных белков в растворе при физиологических условиях: радиусы вращения (Rg) от 2,7±0,1 до 3,1±0,1 нм, максимальные линейные размеры (Dmax) около 9–10 нм и молекулярные массы в диапазоне 47,6–62,0 кДа. Восстановленные из МУРР данных низкоразрешённые пространственные модели оказались согласованными с предсказаниями AlphaFold 3, что подтвердило высокую точность нейросетевого моделирования для этих белков.

Оптимизированы условия кристаллизации для нуклеопротеинов BJNV и SGLV с применением роботизированного скрининга (Mosquito Xtal3). Кристаллы получены при 20°C в растворе 20 mM Tris/150 mM NaCl, pH 7,5 с концентрацией белка 26 mg/ml, используя коммерческий набор для кристаллизации Morpheus II с PEG 3000/4000 и полиолами в составе осадителей. Полученные кристаллы обеспечивали белковую дифракцию до 2,5 Å на станции BL17 SSRF (Шанхай), что открывает перспективы в получении детальных атомарных структур и глубокого понимания молекулярных механизмов.

Согласование вычислительных и экспериментальных данных позволило не только валидировать ИИ-модели, но и сформулировать новые гипотезы о механизмах формирования и функционирования RNP-комплексов вирусов [1]. Полученные результаты расширяют знания о молекулярной архитектуре и биологической функции нуклеопротеинов BJNV и SGLV и создают прочную основу для разработки таргетных антивирусных стратегий и вакцин.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение от 30.05.2025 № 075-15-2025-452).

Литература:

[1] Yanshin A. O. et al. Structural Features of Nucleoproteins from the Recently Discovered Orthonairovirus songlingense and Norwavirus beijiense //International Journal of Molecular Sciences. – 2025. – Т. 26. – №. 15. – С. 7445.

[2] Abramson J. et al. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3 //Nature. – 2024. – Т. 630. – №. 8016. – С. 493-500.

УДм-18

Применение синхротронного излучения для установления структуры и свойств новых актинидсодержащих фаз

Кузенкова А.С.[1,2], Плахова Т.В.[1], Куликова Е.С.[2], Светогоров Р.Д.[2], Тригуб А.Л.[1,2], Крамар Б.В.[1], Шаульская М.Д.[1], Цымбаренко Д.М.[1], Романчук А.Ю.[1], Калмыков С.Н.[1]

1 – Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

2 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

kyznastya@mail.ru

В связи с широким использованием атомных технологий, вопросы, связанные с захоронением радиоактивных отходов (РАО), сегодня волнуют практически все страны. Одним из перспективных методов долгосрочного обращения с РАО является глубинное геологическое захоронение в стабильных геологических формациях с использованием как инженерных, так и естественных барьеров. Исследование взаимодействий радионуклидов с геохимической средой является ключевым фактором при оценке их миграционной способности, и, как следствие, оценки безопасности их нахождения в окружающей среде и возможного переноса в биосферу. Поведение актинидов в окружающей среде в значительной степени определяется их степенью окисления, от которой зависит возможность образования подвижных или, напротив, слабо мобильных физико-химических форм. В представленной работе особое внимание уделяется наиболее радиотоксичным актинидам Pu и Np, а также элементам-аналогам Th и Ce.

Использование синхротронных методов особенно актуально для установления физико-химических форм актинидсодержащих фаз. Повышенная радиотоксичность таких соединений устанавливает необходимость исследования малого количества образца и, в следствии, требует повышенной интенсивности пучка при характеризации фаз различными методами. Для установления структуры и вытекающих из неё свойств новых соединений актинидов, предлагается использование сочетания двух основных методов: рентгеновской дифракции для установления дальнего порядка в кристаллической решетке, а также спектроскопии рентгеновского поглощения (XANES, EXAFS), которая позволяет установить степень окисления актинида и его локальное окружение.

Одним из ключевых компонентов окружающей среды, в том числе подземных вод, является карбонат-анион. Использование синхротронных источников позволило нам впервые установить структуры соединений двойных карбонатов Np и Pu с катионами щелочных и щёлочноземельных металлов, а также подтвердить их термодинамическую стабильность и возможность образования в условиях окружающей среды [1 - 3]. С использованием методов синхротронной рентгеновской дифракции и спектроскопии рентгеновского поглощения нами были уточнены структуры твёрдых фаз $KNpO_2CO_3$ и $KPuO_2CO_3$, которые представляют собой гексагональные слои состава $[NpO_2CO_3^-]$ ($[PuO_2CO_3^-]$) с катионами K^+ между ними, а также впервые установлена структура $NaNpO_2CO_3{\cdot}3H_2O$ с чередующимися орторомбическими слоями $[NpO_2CO_3]_n^{n-}$ с межслоевыми катионными частицами $[Na(H_2O)_3]_n^{n+}$. Кроме того, впервые описана структура двойных карбонатов актинидов с катионами двухвалентных

металлов. Продемонстрирована схожесть структуры слоя соединений $Me_{0,5}NpO_2CO_3 \cdot xH_2O$ (где Me – катион Ca^{2+} или Mg^{2+}) со слоем в твёрдой фазе $NaNpO_2CO_3 \cdot 3H_2O$.

В контексте разработки различных подходов к захоронению РАО одну из ключевых ролей играют фосфатные матрицы. Фосфатная керамика может быть использована в качестве твердофазного материала для иммобилизации радиоактивных отходов, содержащих изотопы высокотоксичных актинидов и редкоземельных элементов. Кроме того, растворённые формы актинидов могут взаимодействовать с фосфатами окружающей среды с образованием малорастворимых соединений, что в дальнейшем будет определять их миграционное поведение. В рамках работы синтезирован и всесторонне охарактеризован ранее не известный двойной наноструктурированный фосфат состава $NaMe_2(PO_4)_3$ (где Me = Pu, Ce, Th). Фаза обладает каркасной структурой и способна вмещать воду и катионы натрия в каналах [4 - 6]. В системах Na-Pu/Ce-PO_4 новый наноструктурированный фосфат может формироваться из наночастиц соответствующих диоксидов при pH ≈ 5, при этом ThO_2 претерпевает фазовые превращения в натрий-фосфатном буфере в гидротермальных условиях в более широком диапазоне pH 5 - 8. Такое переформирование диоксида тория при нейтральных значениях pH, а также термодинамическая стабильность наноструктурированного фосфата указывает на возможность существования представленных соединений в природных средах.

Литература:

[1] Kuzenkova A.S. et al. Formation of Neptunium(V) Carbonates: Examining the Forceful Influence of Alkali and Alkaline Earth Cations // Inorganic Chemistry, 2023, №62 (51), pp. 21025-21035.
[2] Kuzenkova A.S. et al. Neglected solid phase pentavalent plutonium carbonate in the environment // ENVIRONMENTAL SCIENCE-NANO, 2024, №11, pp. 4381 – 4290.
[3] Kuzenkova A.S. et al. Np(V) double carbonate with magnesium: synthesis, solubility and transformation // Dalton Transactions, 2025, in press.
[4] Plakhova T.V. et al. Unexpected nanoscale CeO_2 structural transformations induced by ecologically relevant phosphate species // Chemosphere, 2024, №368, p. 143664.
[5] Listova A.L. et al. Comprehensive Dissolution Study on Two Double Ce(IV) Phosphates with Evidence of Secondary CeO2 Nanoparticle Formation // Molecules, 2025, №30, p. 2105.
[6] Kramar B.V. et al. Formation of a new hydrated sodium–thorium phosphate from thorium dioxide and its subsequent phase evolution // Dalton Transactions,2025, №54, pp. 7360 – 7375.

УДм-19

Исследование пространственной структуры первого белка структурной части полипротеина вируса Хасеки

Осинкина И.А., Гладышева А.В.
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора, Кольцово, Россия
osinkina_ia@vector.nsc.ru

Вирус Хасеки – обнаруженный в 2019 году, потенциально патогенный для человека вирус, отнесенный к семейству *Flaviviridae*, многие из представителей которого, включая вирус Денге и вирус клещевого энцефалита являются социально-значимыми инфекциями. Однако строение его генома существенно отличается от типичных представителей семейства, что затрудняет его изучение с применением классических методов молекулярно-генетического анализа [1]. Кроме того, аминокислотная последовательность полипротеина вируса Хасеки имеет низкий уровень гомологии с последовательностями известных вирусов данного семейства. Ранее, благодаря поиску консервативных доменов и моделированию с применением AlphaFold3 удалось предсказать положение неструктурных доменов NS3 протеазы и геликазы, NS5 RdRp и MTase в полипротеине вируса Хасеки [2]. Однако структурная часть полипротеина вируса Хасеки остается полностью неаннотированной.

С помощью построения скрытой марковской модели с применением сервиса HMMERv3.1b2, а также рутинного моделирования с помощью AlphaFold3 в позициях 1-173 а.о. и 672-831 а.о. были обнаружены неизвестные высокоструктурированные домены SP1 и SP2, предположительно связанные с белком Erns и гликопротеином оболочки. Полученная модель SP1 имела pLDDT=87,4. Парное структурное выравнивание модели с известной структурой белка Erns вируса диареи крупного рогатого скота (PDB ID: 4DVK) показало структурное сходство белков с Tm-score=0,69, RMSD=3,51 Å. Однако обнаруженные домены имеют уровень гомологии ниже 30% с белками известных представителей семейства и полученные результаты не позволяют однозначно идентифицировать SP1.

Для изучения пространственной структуры SP1 были выбраны методы малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и рентгеноструктурного анализа. Реализация данных методов требует получение препарата высокоочищенного белка с концентрацией не менее 10 мг/мл в нативной конформации. Методом ПЦР-сборки с перекрытием были *de novo* собраны оптимизированные по кодонному составу ДНК-копии последовательности, кодирующей SP1 (474 н.п.) и получены устойчивые генетические конструкции pJET1.2/SP1 и PUC19-SP1 для длительного хранения. Путем переклонирования была получена рекомбинантная плазмидная ДНК pET/HSTV-SP1, предназначенная для высокоэффективной продукции в системе *E.coli* рекомбинантного химерного SP1. Плазмидная ДНК pET/HSTV-SP1 содержит аффинную 6x-His метку, сайты протеолиза энтерокиназой и пикорнаином 3c риновируса A28, что обеспечивает возможность хроматографической очистки, отщепления N-концевых белков слияния и получения белка, пригодного для структурных исследований. На основе pET/HSTV-SP1 были созданы штаммы-продуценты BL/pET/HSTV-SP1 и KRX/pET/HSTV-SP1, обеспечивающие синтез рекомбинантного химерного белка SP1. При культивировании

штаммов-продуцентов в течение 20-22 часов при 20°С и 180 об/мин с индукцией 1мМ ИПТГ (+0,1% L-рамнозы для штамма KRX/pET/HSTV-SP1) наблюдался высокий уровень наработки рекомбинантного белка SP1, размером ~27кДа, в растворимой форме в периплазме бактериальных клеток. Удалось получить до 12,7 г биомассы клеток с 1 литра культуры. Рекомбинантный белок SP1 был выделен из лизата биомассы клеток и очищен методами ионообменной (в градиенте pH) и высокоразрешающей эксклюзионной хроматографии. Чистота полученного белка составила >95% по SDS-PAGE с концентрацией >30 мг/мл.

С помощью роботизированной системы Mosquito Xtal3 были проведены попытки подбора условий кристаллизации полученного белка с концентрацией 24 мг/мл методом диффузии паров в висячей капле с использованием наборов для кристаллизации белков Hampton Research. При инкубировании белка в растворе 0,2М тиоцианат калия, 0,1М Трис и 20% ПЭГ 3000 в течение 4 недель при 20°С наблюдалось появление небольших плоских кристаллов. Однако дифракционные тесты, проведенные на линии BL17 Шанхайского источника СИ (SSRF), не подтвердили белковую природу полученных кристаллов.

Для белка SP1 было проведено измерение MUPP на линии BL19U2 SSRF. Были получены данные измерения MUPP от образцов белка SP1 с концентрациями 12.31, 6.54 и 3.12 мг/мл для оценки межмолекулярных взаимодействий белка в растворе. Экспериментальные профили MUPP, позволили определить радиус вращения белковых молекул (Rg) равный 2,4±0,1 – 2,6±0,1нм, максимальный размер частицы (Dmax) 11-13 нм и молекулярную массу: 33,8 – 42,1 кДа, которая варьируется в зависимости от концентрации и составляет больше теоретически рассчитанного для данного белка значения в 27кДа. Кроме того, восстановленная *ab initio* модель пространственной структуры SP1 не в полной мере соответствует форме модели, полученной ранее с помощью AlphaFold3, что может быть связано с пространственной конформацией неструктурированной N-концевой части молекулы. Полученные данные свидетельствуют о существенных различиях между теоретическими и экспериментальными данными для SP1 вируса Хасеки, что может говорить о недостаточной точности предсказания вычислительных методов для изучения структурных белков новых вирусов.

Таким образом, лишь экспериментальные синхротронные методы способны пролить свет на изучение структурных белков вируса Хасеки, которые не только играют роль в жизненном цикле вируса, но и, будучи поверхностными и капсидными белками, являются важными целевыми молекулами для разработки вакцин и иммунобиологических препаратов.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение от 30.05.2025 № 075-15-2025-452).

Литература:

[1] Kartashov M.Y., Gladysheva A.V., Shvalov A.N. et al. Novel Flavi-like virus in ixodid ticks and patients in Russia // Tick Borne Diseasers. 2023. № 14(2). P. 70.

[2] Gladysheva A.V, Osinkina I.A., Radchenko N.S. et al. Tertiary Structures of Haseki Tick Virus Nonstructural Proteins Are Similar to Those of Orthoflaviviruses // International Journal of Molecular Sciences. 2024. №25(24). P. 13654.

УДм-20

Сравнительный анализ структур аминокислот: влияние ароматических взаимодействий на симметрию и деформацию

Шарая С.С.[1,2], Захаров Б.А.[1,2], Богданов Н.Е.[1,3], Болдырева Е.В.[1]

1 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия

2 – Центр коллективного пользования "СКИФ", Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия

3 – Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

s.sharaya@g.nsu.ru

Важную роль в формировании кристаллической структуры аминокислот играет система водородных связей, при этом, благодаря разнообразию боковых радикалов, в их кристаллических структурах присутствует множество возможных донорных и акцепторных групп. Кроме того, для некоторых аминокислот возможно формирование ароматических взаимодействий. При этом сравнительный анализ структур позволяет оценить вклады различных видов водородных связей и других межмолекулярных взаимодействий в кристаллическую упаковку и деформацию кристаллов при измении температуры или давления.

В данной работе рассмотрены два интересных случая влияния боковой цепи на кристаллическую структуру или её деформацию. В ряду «L-валин, L-лейцин, L-изолейцин и L_фенилглицин» все четыре аминокислоты обладают небольшой гидрофобной боковой цепью. Ранее предполагалось, что они имеют схожие кристаллические структуры с пространственной группой $P2_1$, $Z' = 2$ и L2-L2 мотивом водородных связей [1]. Однако при подробном анализе выяснилось, что фенильные радикалы в L-фенилглицине, ранее описанные как разупорядоченные, образуют сверхструктуру за счёт ароматических взаимодействий. Предложена структурная модель в $P1$ с $Z' = 8$. Также обсуждается роль ароматических взаимодействий и водородных связей в формировании структур аминокислот ряда и термической деформации L-фенилглицина. Во втором примере рассмотрена барическая деформация L-тирозина и L-аланина. Обе аминокислоты претерпевают похожую структурную реорганизацию при 2 ГПа, связанную с изменениями водородных связей, образованных NH_3^+ группой [2]. Однако, барическая деформация L-аланина и L-тирозина различается из-за наличия у последнего дополнительной водородной связи O—H···O и ароматических взаимодействий C—H···Cg. При этом водородная связь упрочняет структуру в соответствующем кристаллографическом направлении, а ароматические взаимодействия делают ее более деформируемой.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00410, https://rscf.ru/project/24-23-00410/.

Литература:

[1] Görbitz C. H., Vestli K., Orlando R. // Acta Cryst B. 2009. № 3 (65). С. 393–400.

[2] Tumanov N. A. [и др.]. // Acta Cryst B. 2010. № 4 (66). С. 458–471.

УДм-21

Изучение явления автоколебаний в окислительных реакциях на палладиевом и никелевом катализаторах методами in situ рентгеновской дифракции

Винокуров З.С.[1], Лашина Е.А.[2], Каичев В.В.[2], Сараев А.А.[1]
1 – ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ИК СО РАН, Новосибирск, Россия
z.s.vinokurov@srf-skif.ru

Многие гетерогенные каталитические реакции демонстрируют необычное поведение, включая колебания скорости реакции, пространственно-временные закономерности и детерминированный хаос [1]. Исследования таких кинетических неустойчивостей in situ открывают новые возможности для изучения механизмов этих каталитических реакций.

Работа посвящена исследованиям автоколебаний скорости окисления метана и CO на Pd- и Ni-катализаторах в проточном реакторе с использованием метода рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии. Эксперименты проводились на станции «Прецизионная дифрактометрия II» (СЦСТИ, Новосибирск, Россия) [2]. Дифрактометр был оснащен высокотемпературной реакционной камерой собственной разработки, позволяющей с минимальной активностью материалов камеры в исследуемой реакции регистрировать дифракционные картины в диапазоне температур от комнатной до 700 °C в различных средах, и квадрупольным газоанализатором UGA-100 (Stanford Research Systems Inc.) для анализа продуктов реакции и реагентов. Эксперименты по рентгеновской дифракции с временным разрешением проводились с использованием позиционно-чувствительного детектора OD-3M (ИЯФ СО РАН) [3]. Выбор рабочей энергии излучения определялся однократным отражением от плоского идеального кристалла-монохроматора (7.162 кэВ, 0.1731 нм для кристалла Ge(111); 7.551 кэВ, 0.1642 нм для Si(111); 12.273 кэВ, 0.1010 нм для Si(220)) и выбирался исходя из условий эксперимента. Для подачи исходной газовой смеси с заданными пропорциями использовались регуляторы массового расхода SEC-Z500 (Horiba Ltd.).

Согласно результатам, как для реакции окисления метана на палладии, так и для реакции окисления CO никеле, при определенных условиях (температур и концентраций газов) существует область возникновения автоколебаний скорости реакции. Такого типа нелинейность сопровождается (Рис. 1) синхронными периодическими изменениями, как фазового состава поверхности катализаторов, так и температуры катализатора и соотношениями продуктов реакции в газовой фазе.

Так в низкоактивном состоянии поверхность катализатора окислялась, а переход в высокоактивное состояние происходил одновременно с образованием металлической фазы. Кроме этого, на поверхности палладиевого катализатора наблюдалось образование фазы PdCx с большим параметром решетки, которая также влияла на кинетику процесса.

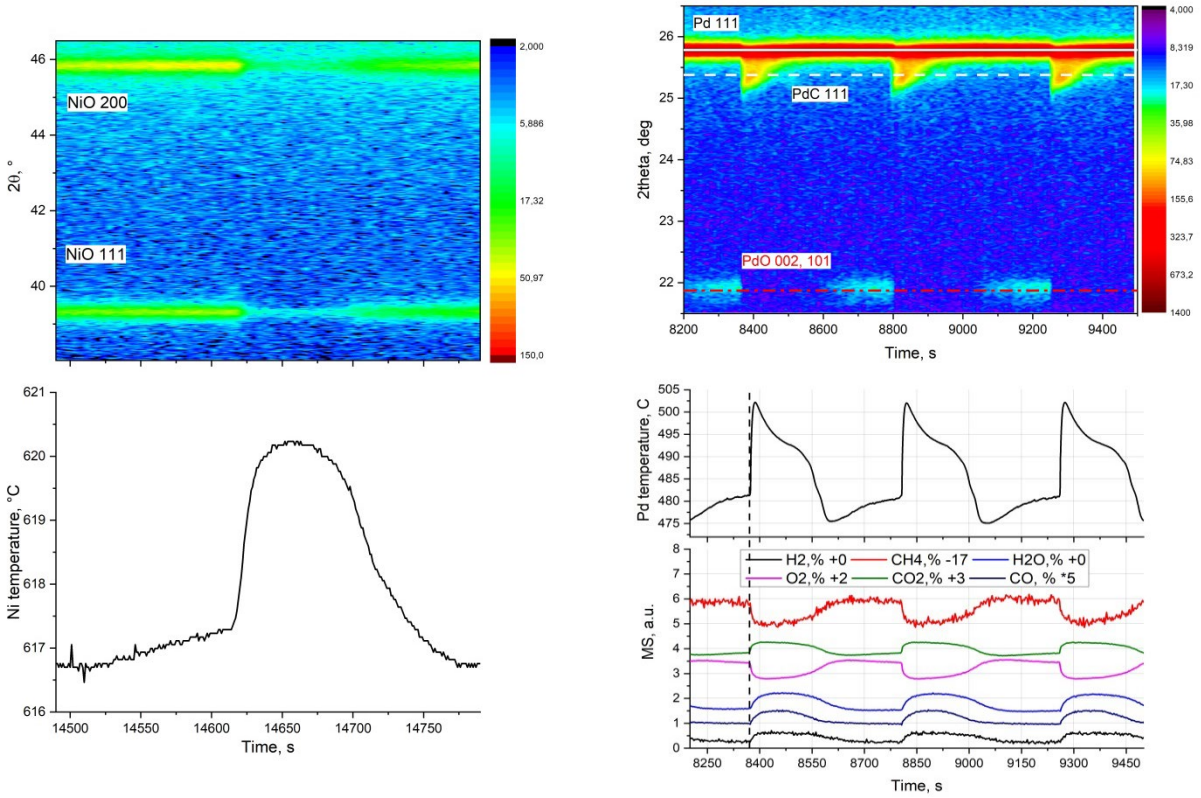


Рис. 1. Автоколебания фазового состава, температуры и продуктов реакции в реакции окисления CO на никеле(слева), в реакции окисления CH_4 на палладии (справа).

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] R. Imbihl, G. Ertl, Chem. Rev. 95 (1995) 697.
[2] A. A. Saraev, Z. S. Vinokurov, A. N. Shmakov, V. V. Kaichev and V. I. Bukhtiyarov, Kinet. Catal., 2018, 59, 810–819.
[3] V.M. Aulchenko, O.V. Evdokov at al, Nucl. Inst. Methods Phys. Res. A 603 (2009) 76.

УДсп

Современные системы неразрушающего анализа и формирования покрытий: от лабораторного оборудования к синхротронной станции

Горностаев Д.А., Смирнов Д.И., Цветков Ю.В.
ООО «Адватекс», Москва, Россия
advatex@bk.ru

Реализация масштабных проектов класса «мегасайенс» требует широкой кооперации «наука – бизнес – образование» [1]. Технологическая компания «АДВАТЕКС» принимает активное участие в опытно-конструкторских работах, а также в поставке научно-исследовательского оборудования для реализуемой в России программы по созданию синхротронных центров нового поколения.

В докладе рассматривается опыт участия компании в нескольких проектах исследовательских станций для сибирского кольцевого источника фотонов «СКИФ». В частности, обсуждаются особенности систем монокристальной дифрактометрии для станции 1-4 Б, а также фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy – ARPES) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии при давлении, близком к атмосферному, (Near-Ambient-Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy – NAP-XPS) для станции 1-6-1, 1-6-2 «Электронная структура» [2].

Делается акцент на проблемах и перспективах разработки и поставки современного исследовательского оборудования в условиях западных санкций и политики импортозамещения. Одна из задач – адаптация доступных на рынке лабораторных систем под стандарты синхротронных станций. Следует отметить, что технологические партнеры компании «АДВАТЕКС» из дружественных стран также имеют опыт участия в подобных проектах, например, запускаемого в эксплуатацию синхротронного источника HEPS (Хуайжоу, КНР) [3].

Отдельного внимания заслуживает тот факт, что вышеперечисленные методы исследования продолжают совершенствоваться и динамично развиваться. Так, монокристальная дифрактометрия открывает новые горизонты для структурных исследований. Развитие серийной кристаллографии, новых детекторных систем и алгоритмов обработки данных обещает дальнейшие прорывы в понимании структуры и динамики вещества на атомарном уровне. Гибридные фотон-счетные детекторы стали доминирующей технологией, кардинально трансформировав экспериментальные возможности современных синхротронов. Наряду с общепризнанными швейцарскими лидерами в создании детектирующих систем на рынке за последнее время появились новые игроки.

Метод фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением претерпел значительную эволюцию в связи с внедрением времяразрешенной (TR-ARPES) и спин-разрешенной (SR-ARPES) спектроскопии, а также nano-ARPES для микроскопических исследований [4]. Современные синхротронные источники могут обеспечить субмикронное пространственное и фемтосекундное временное разрешение.

УДсп

Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии при давлении, близком к атмосферному, представляет собой революционный подход, позволяющий проводить исследования поверхностей в газовых средах при давлениях до ~10-100 мбар. Эта технология преодолела основное ограничение традиционной спектроскопии – необходимость сверхвысокого вакуума, открыв возможности для *operando* исследований каталитических, коррозионных и электрохимических процессов.

Более того, научная тенденция к изучению материалов в условиях *operando* или *in situ* требует современных и сложных шлюзовых и реакторных камер, способных обеспечить точный контроль газовой или жидкостной среды, давления и температуры при сохранении совместимости с различными аналитическими методами [5]. В этой связи уже сейчас необходимо предусмотреть задел под модернизацию исследовательских станций: возможность использования сменных аналитических приставок и многоосевых (в том числе криогенных) манипуляторов и трансляторов. Следует отметить быстрое расширение «линейки» исследовательских приставок: дифракция быстрых или медленных электронов на отражение, спектроскопия комбинационного рассеяния света, сканирующая туннельная, атомно-силовая и магнито-силовая микроскопия, инфракрасная спектроскопия, нелинейная оптическая микроскопия и т. д.

Интеграция базовых синхротронных методов исследования с другими аналитическими методиками и развитие многомодальных подходов, воплощенное в современном оборудовании, позволит решать все более сложные научные задачи в области структурной биологии, материаловедения и нанотехнологий.

Литература:

[1] Ицковиц Г. Тройная спираль: университеты-предприятия-государство : инновации в действии. – Томск, 2010. – 237 с.
[2] Шефер К. И. (общ. ред.) Технологическая инфраструктура сибирского кольцевого источника фотонов «СКИФ»: в 3 т. – Т. 1: Экспериментальные станции первой очереди и Лабораторный комплекс / сост. Я. В. Зубавичус. – Новосибирск : ИК СО РАН, 2022. – 310 с.
[3] He P., *et al*. Update on HEPS Progress // *Synchrotron Radiation News*, 2023. – Vol. *36*(1). – P. 16–24.
[4] Magdy M. A Brief Account of the Technology Significance of Synchrotron Radiation: A State-of-the-art Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy (ARPES) // *Current Analytical Chemistry*, 2025. – Vol. 21. – P. e15734110371322.
[5] Velisoju V. K., *et al*. Multi-technique *operando* methods and instruments for simultaneous assessment of thermal catalysis structure, performance, dynamics, and kinetics (Review) // *Chem Catalysis*, 2023. – Vol. 3, Is.8. – P. 100666.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

– Оборудование для станций СИ ЦКП СКИФ

СД-I-01 ÷ СД-I-25

– Теоретические и прикладные аспекты экспериментальных методов, использующих синхротронное излучение ЦКП СКИФ

СД-II-01 ÷ СД-II-29

– Новые алгоритмы обработки данных, искусственный интеллект и машинное обучение при массовом анализе данных ЦКП СКИФ

СД-III-01 ÷ СД-III-05

– Структура катализаторов и функциональных материалов на основе синхротронной диагностики

СД-IV-01 ÷ СД-IV-61

– Синхротронное излучение для структурной биологии

СД-V-01 ÷ СД-V-10

СД-I-01

Тестирование рентгеновской оптики для синхротронных исследований на базе лабораторного рентгенооптического комплекса

Баранников А.А., Зверев Д.А., Лятун И.И., Панормов И.Б., Снигирев А.А.
Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, Россия
abarannikov95@gmail.com

С момента своего появления синхротронные источники стали практически основными инструментами для реализации самых передовых научных исследований с использованием рентгеновского излучения. Несмотря на это, доступность таких «Мегасайенс»-установок весьма ограничена. Это связано с высокой конкуренцией среди пользователей, высокой стоимостью «экспериментального времени», а также высокой длительностью рассмотрения заявок на исследования. Данные факторы требуют тщательной проработки плана эксперимента, чтобы выделенное пользователям время было использовано максимально эффективно. Вдобавок это затрудняет тестирование новой рентгеновской оптики и экспериментальных методов.

В данном контексте особое значение приобретает возможность и качество подготовки, проводимой еще до начала проведения синхротронного эксперимента. В настоящей работе представлены результаты тестирования рентгеновской оптики на базе специально разработанного для этих задач лабораторного комплекса [1] (Рис. 1).

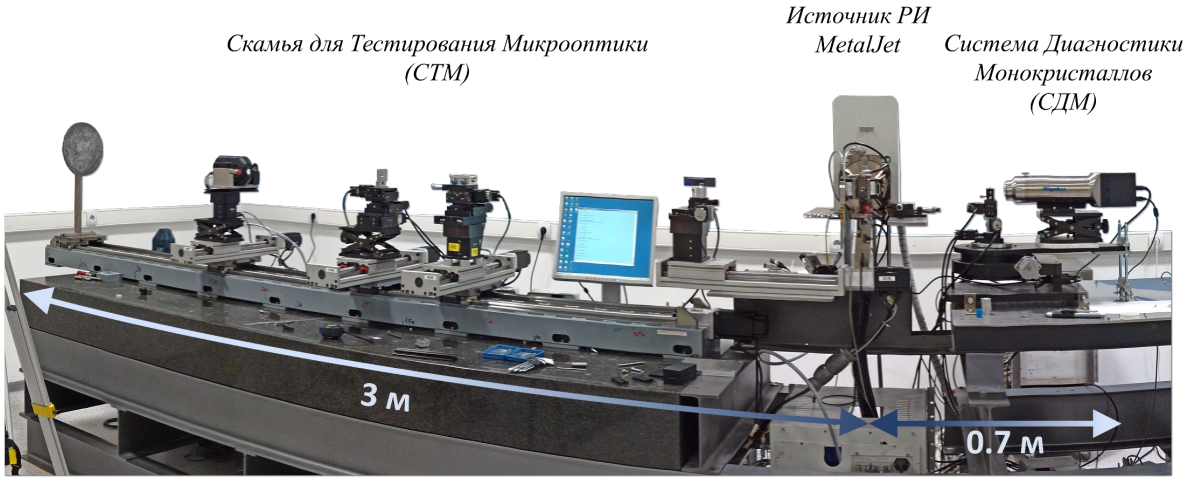


Рис. 1. Фотография лабораторного комплекса

Данный комплекс позволяет значительно сократить время синхротронного эксперимента, а также повысить его качество, принимая на себя ряд 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 [2]. Кроме того, комплекс активно используется для тестирования оптики, изготавливаемой для новых российских синхротронов 4-го поколения, а именно преломляющих рентгеновских линз [3,4], трансфокаторов [5,6] и алмазной оптики [7,8].

СД-I-01

Основным элементом комплекса является микрофокусный рентгеновский источник Excillum MetalJet с жидким GaIn анодом (GaKα, E = 9.25 кэВ, λ = 1.34 Å). 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.

Литература:

[1] Barannikov A. A. et al. Testing of X-ray Optics for Synchrotron Studies using a Laboratory Microfocus X-ray Source //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2024. – Т. 18. – №. Suppl 1. – С. S24-S33.
[2] Barannikov A. et al. X-ray diffraction imaging of the diamond anvils based on the microfocus x-ray source with a liquid anode // Rev. Sci. Instrum. 2022. Vol. 93, № 8. P. 083903.
[3] Petrov A.K. et al. Polymer X-ray refractive nano-lenses fabricated by additive technology // Opt. Express. 2017. Vol. 25, № 13. P. 14173.
[4] Barannikov A. et al. Optical performance and radiation stability of polymer X-ray refractive nano-lenses // J. Synchrotron Rad. 2019. Vol. 26, № 3. P. 714–719.
[5] Narikovich A. S. et al. X-ray Transfocators: Tunable X-Ray Focusing Apparatus Based on Compound Refractive Lenses //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2023. – Т. 17. – №. 6. – С. 1258-1266.
[6] Narikovich A. et al. CRL-based ultra-compact transfocator for X-ray focusing and microscopy // J. Synchrotron Rad. 2019. Vol. 26, № 4. P. 1208–1212.
[7] Shevyrtalov S. et al. Towards high-quality nitrogen-doped diamond single crystals for X-ray optics // J. Synchrotron Rad. 2021. Vol. 28, № 1. P. 104–110.
[8] Barannikov A. et al. X-ray diffraction imaging of diamond x-ray optics in the laboratory // Advances in X-Ray/EUV Optics and Components XVI. SPIE, 2021. P. 24.

СД-I-02

Моделирование эксплуатационных режимов рентгенооптических элементов ондуляторных фронтендов синхротронных источников поколения 4+

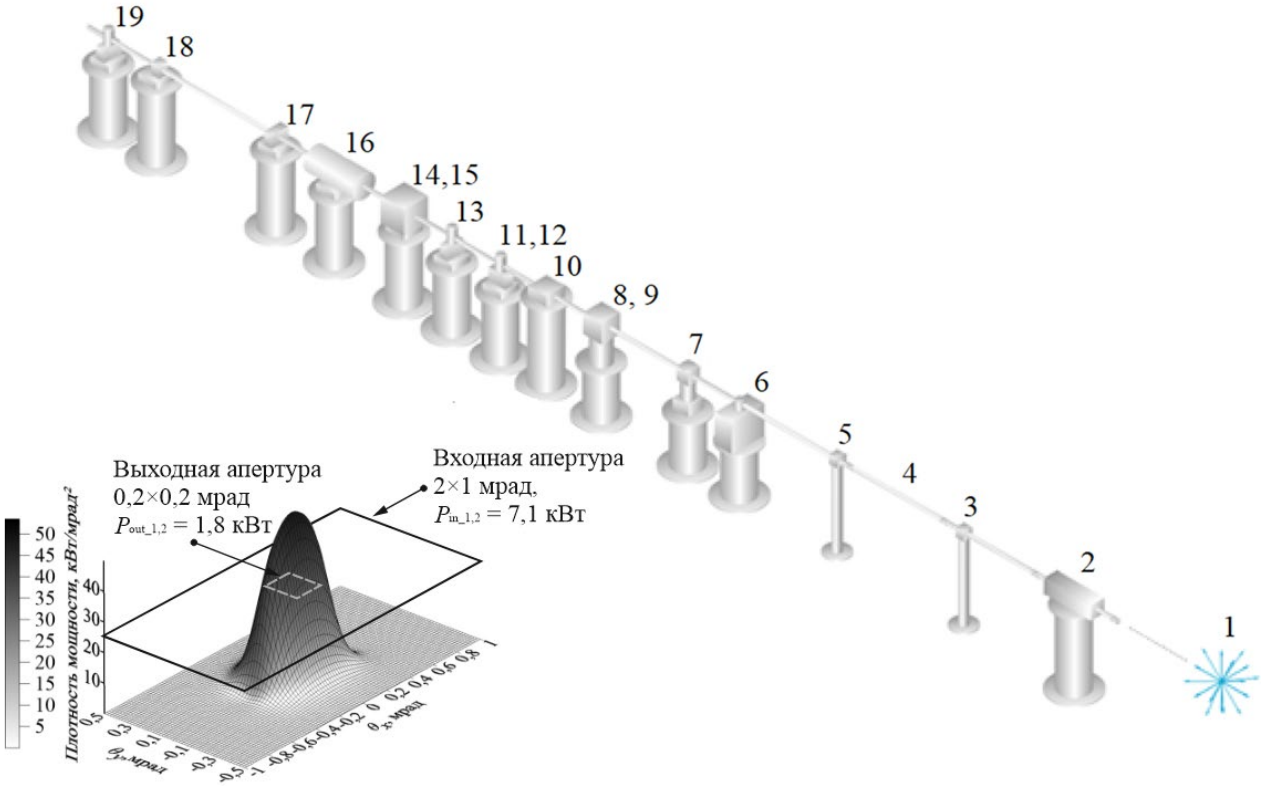
Завьялов П.С.[1], Макаров С.Н.[1], Белоусов А.П.[1], Золотарев К.В.[2], Николенко А.Д.[2], Овсянник В.В.[2]

1 – Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия

belousovap@tdisie.nsc.ru

Фронтенд – часть канала синхротронного излучения (СИ), обеспечивающий сопряжение вакуумных, радиационных и оптических условий источника СИ с экспериментальными станциями. Проведён численный анализ тепловых и механических режимов работы ключевых рентгенооптических элементов фронтендов, разработанных для ондуляторных каналов 1-1 и 1-2 Сибирского кольцевого источника фотонов (СКИФ) [1], где выходная мощность пучка оценивается в 7,1 кВт (рис. 1).



1. Источник СИ; 2. Магнит коллиматор; 3, 5. Подставка; 4. Резервная оптическая вакуумная секция; 6. Откачной вакуумный порт; 7. Фиксированная маска (16,4 м); 8. Подвижная тепловая шторка (17,0 м); 9. Регулируемая маска (17,5 м); 10. Люминесцентный монитор пучка; 11. Откачной вакуумный порт №1; 12. Алмазное окно (18.6 м); 13. Откачной вакуумный порт №2; 14. Пневматический радиационный затвор (20.0 м); 15. Аварийный шибер; 16. Радиационный коллиматор поглощения тормозных ливней; 17. Система ввода лазерного луча для трассировки элементов экспериментальной станции; 18. Алмазное окно; 19. Откачной вакуумный порт.
Рис. 1. Схема фронтендов 1-1, 1-2.

Моделирование выполнено методом конечных элементов (COMSOL Multiphysics 6.2) с учётом неравномерного распределения плотности мощности (SPECTRA v.11.1.2) [2].

Рассмотрены распределения температуры и механических напряжений для фиксированной и регулируемой масок, подвижной тепловой шторки, пневматического радиационного затвора, алмазных окон и фильтров. Результаты показывают, что применяемые системы охлаждения обеспечивают стабильную работу элементов фронтенда при максимальных тепловых нагрузках.

Фиксированная маска (ФМ) формирует выходной пучок и отводит избыточную мощность, выполнена из сплава БрХ1, цилиндр с внутренним вырезом в форме пирамиды, охлаждается спиральным каналом с деионизированной водой. Максимальная температура – 130 °C, пиковые механические напряжения по Мизесу – 280 МПа.

Подвижная тепловая шторка (ПТШ) управляет поглощением длинноволновой части спектра пучка, снижая тепловую нагрузку на последующие элементы. Бериллиевый диск толщиной 1,5 мм охлаждается медными контактами с проточной водой. Пиковая температура – 215 °C, напряжения по Мизесу – 280 МПа.

Регулируемая маска (РМ) позволяет изменять размеры пучка с помощью четырёх медных створок. Каждая створка может поглощать до 1 кВт, пиковая температура – 370 °C, напряжения по Мизесу – 370 МПа.

Пневматический радиационный затвор (РЗ) перекрывает пучок для защиты персонала, поглощает до 2 кВт. Максимальная температура – 105 °C, напряжения по Мизесу – 67 МПа.

Алмазные окна и фильтры разделяют вакуумные объёмы и поглощают длинноволновую часть пучка. Монокристаллический CVD-алмаз толщиной 0,4 мм выдерживает перепад давления до 700 торр. Пиковая температура – 410 °C, напряжения по Мизесу – 290 МПа, что безопасно для материала.

Применение сплавов с высокой теплопроводностью и прочностью, увеличение площади контакта пучка с охлаждаемой поверхностью и оптимизация каналов отвода тепла обеспечивают эффективное рассеивание тепловой мощности и стабильную работу всех элементов фронтенда.

Проведённое моделирование показало, что разработанные рентгенооптические элементы фронтендов выдерживают пиковые тепловые и механические нагрузки и пригодны для эксплуатации в каналах 1-1 и 1-2 СКИФ [3].

Литература:

[1] Shkaruba V. A., Bragin A. V., Volkov A. A. et al. Superconducting Wigglers and Undulators for Synchrotron Radiation Generation at the SKIF Storage Ring // Phys. Part, and Nuclei Lett. 2023. 20, Iss. 4. P. 904-908. DOI: 10.1134/S1547477123040623.
[2] SPECTRA: a synchrotron radiation calculation code. URL: http://spectrax.org/spectra/index.html.
[3] Завьялов П. С., Макаров С. Н., Белоусов А. П., Золотарев К. В., Николенко А. Д., Овсянник В. В. Моделирование тепловых и механических режимов работы рентгенооптических элементов сверхъярких пучков синхротронного излучения из источников поколения 4+ // Автометрия. 2025. Т. 61, № 4, С. 1 –15

СД-I-03

Экспериментальная станция второй очереди 2-2

Борщевский В.И.
Московский физико-технический институт, Москва, Россия
borshchevskiy@gmail.com

Экспериментальная станция второй очереди 2-2 «Белок» в составе Центра коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» (СКИФ) предназначена для реализации современных подходов в макромолекулярной кристаллографии. Она будет единственной специализированной микрофокусной кристаллографической линией в России и объединит возможности высокопроизводительных автоматизированных экспериментов, серийной и время-разрешённой кристаллографии. Оптическая система станции обеспечивает работу как с монохроматическим, так и с «розовым» пучком в диапазоне энергий 8–27 кэВ, с фокусировкой до единиц микрометров. Предусмотрено два экспериментальных хатча: HARD MX для прецизионных исследований с высоким пространственным разрешением и PINK MX для серийной кристаллографии и экспериментов при комнатной температуре. Станция рассчитана на широкий спектр задач фундаментальной науки и фармацевтической индустрии — от исследования динамики функционирования белков и белково-нуклеиновых комплексов до разработки лекарств на основе фрагментов и инженерии терапевтических антител. Станция 2-2 станет платформой для российских и международных исследователей, предоставляя доступ к наиболее современным методам структурной биологии.

Благодарности: Автор выражает признательность Министерству науки и высшего образования Российской Федерации за поддержку (соглашение № 075-03-2025-662, проект FSMG-2024-0012).

СД-I-04

Проект LIGA-станции для источника синхротронного излучения «СКИФ»

Генцелев А.Н.[1], Гольденберг Б.Г.[1,2], Баев С.Г.[3], Кузнецов С.А.[4,5.]
1 – Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП "СКИФ" Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия
3 – Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск, Россия
4 – Новосибирский государственный университет (НГУ) , Новосибирск, Россия
5 – Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия
ang1209@mail.ru

Разработка технологии изготовления элементов оптических систем для работы с терагерцовым излучением, таких как частотные фильтры, фокусаторы, поляризаторы и др., является актуальной экспериментальной задачей [1]. Как было показано нами ранее, данная задача может быть эффективно решена при использовании высокоаспектных микроструктур, как в чисто металлическом (ММС), так и в псевдометаллическом (ПММС) исполнении [2,3].

Такие микроструктуры представляют собой массивы периодически расположенных субволновых отверстий, разделенных узкими перемычками (типичные размеры отверстий сотни мкм, а перемычек – десятки мкм), толщина (высота) микроструктур имеет масштаб размера отверстий (были изготовлены структуры из ПММА толщиной 0,4÷3 мм). В отличие от ММС структуры в виде ПММС изготавливаются путем структурирования полимера, применяя технологию глубокой рентгеновской литографии с последующим покрытием всей поверхности структуры металлом с толщиной не менее характерной толщины скин-слоя ТГц излучения.

На базе Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучений (СЦСТИ, ИЯФ СО РАН) освоены базовые технологии изготовления ММС и ПММС структур, включающие в себя этапы: 1) создание подложек из высокополимерного ПММА (имеющего молекулярную массу ~10^7 и характеризующегося более высокой ударной вязкостью и прочностью); 2) изготовление высококонтрастных LIGA-шаблонов из танталовой фольги толщиной 30 мкм; 3) проведение экспонирования полимерной подложки пучком СИ через LIGA-шаблон на LIGA-станции; 4) металлизации структурированной поверхности полимера по комбинированной технологии, включая химическое осаждение металла, магнетронное напыление и гальванопластику; 5) напыление защитных антикоррозийных алюминиевых покрытий, препятствующих окислению толстого гальванически осаждённого медного слоя.

В докладе рассматривается проект новой LIGA-станции на источнике СИ «СКИФ», которая будет использоваться в том числе для дальнейшего усовершенствования технологии изготовления квазиоптических терагерцовых ПММС-структур, с целью существенно повысить их механическую прочность и сроки эксплуатации. Предлагается создать станцию наподобие той, которая в данное время смонтирована в бункере СИ накопителя ВЭПП-3М. В принципе, эти работы могут быть продолжены на станции X-TECHNO [4] второй очереди источника «СКИФ» в режиме прямого пропускания пучка СИ (либо на LIGA-станции, пристыкованной к станции X-TECHNO за модулем прямого пучка). Станции X-TECHNO довольно сложна в своей комплектации и реализации, в то время, как LIGA-станция может быть создана путём переноса

уже готового оборудования с ВЭПП-3М на «СКИФ» без какой-либо существенной модернизации (возможно, дополненная водяным охлаждением подложкодержателя).

Литература:

[1] Кузнецов С.А., Генцелев А.Н., Гольденберг Б.Г. и др. // Вестник НГУ Серия: физика. 2012. Том 7, выпуск 4. С. 25-42.
[2] Генцелев А.Н., Кузнецов С.А., Дульцев Ф.Н. и др. // Автометрия. 2019. №2. С. 14–27.
[3] Генцелев А.Н., Баев С.Г. // Автометрия. 2022. № 2. С. 104-112.
[4] Назьмов В.П., Гольденберг Б.Г. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед., 2023. №11. С.107-112.

СД-I-05

Концептуальный проект станции «РФА-Геология» ЦКП «СКИФ»

Ракшун Я.В.[1,2], Дарьин Ф.А.[3], Шацкий А.Ф.[4], Дарьин А.В.[1], Ращенко С.В.[1], Хомяков Ю.В.[2,3], Чернов В.А.[2]

1 – Институт геологии и минералогии имени В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Институт ядерной физики имени Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

3 – Центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов», Кольцово, Россия

4 – Институт геохимии и аналитической химии имени В.И. Вернадского РАН, Москва, Россия

f.a.darin@inp.nsk.su

Большая глубина проникновения жёсткого рентгеновского излучения с энергией квантов порядка 100 кэВ открывает широкие перспективы для геологических исследований, позволяя проводить недеструктивный анализ плотных макроскопических образцов (минералов, расплавов), содержащих заметные концентрации элементов с высоким атомным номером. В число таких образцов входят, например, мантийные ксенолиты (в т.ч. алмазоносные), а также фрагменты пород щелочных комплексов с которыми связаны месторождения редких и редкоземельных металлов. Для задач геофизики и геологоразведки важным является визуализация внутреннего строения образцов пород и пространственного распределения минеральных фаз, идентификация индивидуальных, в т.ч. новых, минералов, визуализация взаимной ориентировки кристаллических зёрен. Кроме того, важной задачей является реконструкция происхождения месторождений, т.е. понимание механизмов концентрации рудных компонентов в мантии. Для решения этой задачи важны исследования структур и физических свойств мантийного вещества, определения фундаментальных констант и *P-V-T* уравнений состояния кристаллических веществ, жидкостей и флюидов, исследование кинетики протекания химических реакций *in situ* при высоких давлениях и температурах. Эту информацию необходимо получать комбинацией рентгеновских методов томографии, дифракции и рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) в жёстком рентгеновском диапазоне на пучках излучения с поперечными размерами от ~10 мкм до ~10 см.

Несмотря на то, что энергия электронов в накопительном кольце строящегося ЦКП «СКИФ» составляет невысокие по меркам источников СИ 3 ГэВ, что накладывает ограничение на «жёсткость» спектра, генерация высокоэнергетических рентгеновских квантов остаётся решаемой технологической задачей. Для её решения существует два принципиально разных подхода: использование многопериодных вигглеров или сильнопольных шифтеров. В первом случае за высокий поток фотонов в жёстком диапазоне приходится расплачиваться крайне высокими тепловыми нагрузками на оптические элементы и вакуумную систему экспериментальных станций из-за интенсивности «паразитного» излучения в низко- и среднеэнергетической части спектра. Кроме того, вигглер формирует набор точечных источников вблизи оси излучения (магнитная длина ~1-2 м, число периодов ~10), что существенно затрудняет формирование «микрозонда» рентгеновской оптикой из-за ограниченности глубины резко изображаемого пространства. В свою очередь, даже для

короткого шифтера (~100 мм) достижимы в разы более высокие магнитные поля и соответствующие критические энергии СИ. Иначе говоря, шифтер позволяет формировать «точечный» источник с максимальной жёсткостью спектра излучения, сохраняя при этом в задачах с микрофокусировкой возможность реализовать преимущество источника СИ 4-го поколения – сверхнизкий эмиттанс. При этом также сохраняется возможность работать с широким расходящимся пучком СИ размером ~10 см.

На данный момент единственной запланированной станцией ЦКП «СКИФ» с сильнопольным шифтером (8 Тл и выше) в качестве вставного устройства является «РФА-Геология» (вторая очередь). Предполагается, что станция будет функционировать в диапазоне энергий ~40-130 кэВ, и на ней будут реализованы следующие методы: компьютерная томография, энергодисперсионная дифракция, микродифракция и микро-РФА (в т.ч. в конфокальной схеме).

В рамках концептуального проекта станции «РФА-Геология» обоснован выбор вставного устройства с определёнными параметрами, разработана согласованная рентгенооптическая схема станции, выполнен рентгенооптический расчёт и предложены системы окружения образца для проведения экспериментов перечисленными ранее методами.

СД-I-06

Эскизный проект станции 2-1 «Инженерное материаловедение»

Довженко Г.Д.[1,2], Батаев И.А.[2], Эмурлаев К.И.[1,2], Насенник И.Е.[1,2], Александрова Н.С.[1,2], Юргин А.Б.[1,2], Зверев Д.А.[3], Снигирев А.А.[3], Климова-Корсмик О.Г.[4]

1 – ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, Кольцово, Россия

2 – Новосибирский государственный технический университет «НЭТИ», Новосибирск, Россия

3 – Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Калининград, Россия

4 – Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Санкт-Петербург, Россия

g.d.dovzhenko@srf-skif.ru

Современное материаловедение охватывает широкий спектр задач от фундаментальных аспектов строения веществ, до разработки технологий получения новых материалов и производства из них деталей машин и механизмов. Свойства материалов определяются их структурой, которая, в свою очередь, формируется на различных этапах производства под воздействием внешних факторов, таких как пластическая деформация и термическая обработка. Для «тонкой настройки» свойств конструкционных материалов и их оптимизации для решения конкретных задач важно понимать особенности эволюции структуры при реализации различных технологий, таких как литьё, сварка, наплавка, ковка, штамповка, закалка и т.д. Современный этап развития материаловедения характеризуется активным внедрением инновационных производственных процессов, в частности технологий аддитивного производства (3D-печати). В число основных задач станции 2-1 «Инженерное материаловедение» входит проведение in situ исследований структурных изменений материалов под воздействием современных и перспективных технологических процессов, а также при моделировании реальных эксплуатационных условий.

В число основных методик станции «Инженерное материаловедение» входят: порошковая дифракция, светлопольная рентгеновская микроскопия, рентгеновская томография. Диапазон рабочих энергий фотонов 30-90 кэВ.

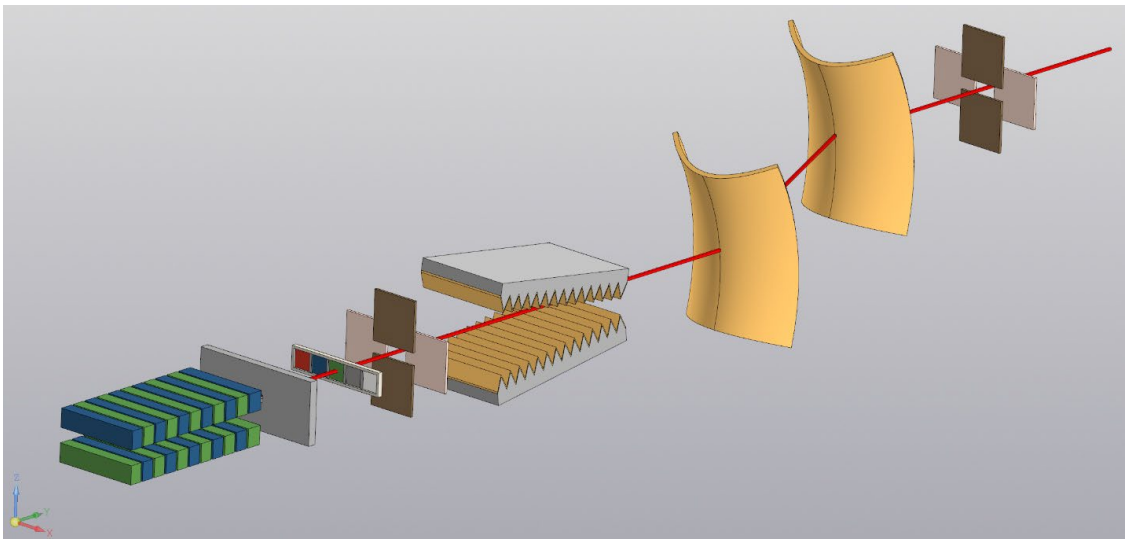


Рис. 1. Оптическая схема станции «Инженерное материаловедение»

СД-I-06

Оптическая схема станции представлена на рисунке 1. Основные элементы станции слева направо: источник излучения (вигглер), фиксированная маска фронтенда, блок фильтров, моторизированные щели, мультипризматическая линза, двухкристальный монохроматор с сагиттальной фокусировкой, выходная щель. Данная схема позволяет получить сфокусированный пучок на образце размером не более 500 на 500 мкм (рисунок 2) с потоком $1.3 \div 2.3 \cdot 10^{12}$ ф/с в диапазоне энергий $\hbar\vartheta = 30 \div 90$ кэВ и шириной полосы пропускания $\Delta E/E \approx 10^{-3}$. Также есть возможность работы с несфокусированным пучком размером 110 на 12 мм и потоком фотонов $1.2 \div 1.9 \cdot 10^{13}$ ф/с.

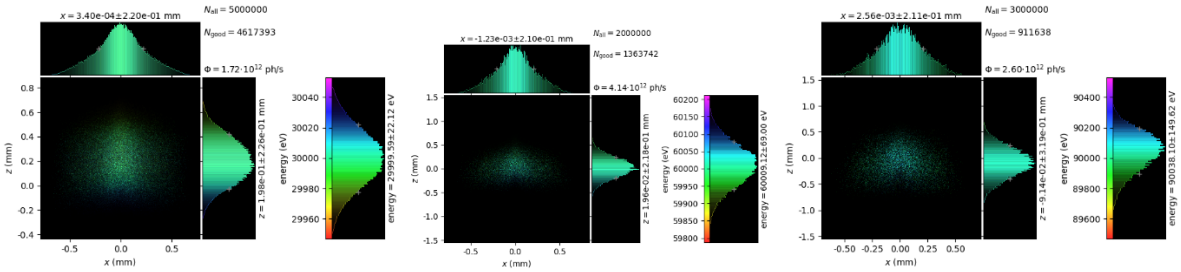


Рисунок 2. Поток на образце для энергий фотонов 30, 60, 90 кэВ рассчитанный методом трассировки лучей. Станция работает в режиме фокусировки.

Ключевые научные задачи станции предполагается решать с использованием in situ ячеек. Станция будет работать в режиме «Plug and Play», предоставляя пользователям возможность приезжать со своими окружениями образца и подключать их к системе управления. Также в основную комплектацию станции включены собственные окружения образца, имитирующие металлургические производственные процессы, в том числе лазерный 3D-принтер, закалочный дилатометр, вакуумная печь с интерферометрическим контролем поверхности.

СД-I-07

Разработка оптической схемы станции «Монокристалл» ЦКП «СКИФ» для *in situ* и *operando* рентгеноструктурного анализа с высоким пространственным и временным разрешением

Жданкин Г.И.[1,2], Захаров Б.А.[1,2]

1 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия

2 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия

g.zhdankin@g.nsu.ru

Создание специализированной станции для исследования монокристаллов методом рентгеноструктурного анализа (РСА) на базе источника синхротронного излучения является важным с точки зрения современных направлений физики, химии, биологии, геологии и материаловедения. РСА позволяет определять кристаллическую структуру исследуемых образцов, а значит, является одним из ключевых методов для установления взаимосвязи «структура-свойство». Эта информация необходима для разработки новых материалов и предсказания изменения их свойств при варьировании внешних условий. Малые размеры пучка, высокая интенсивность синхротронного излучения и возможность варьирования длины волны позволяют проводить эксперименты, недоступные или трудно реализуемые на лабораторных источниках: определение структуры (в том числе и абсолютной) образцов малых размеров, не превышающих сотен нанометров, *in situ* и *operando* в условиях низких температур (вплоть до 5 К) и высоких давлений (0,1 ГПа и выше) [1,2]. Также смогут быть реализованы времяразрешенные эксперименты, такие как *pump-probe* дифракционные исследования быстропротекающих процессов ($\tau \leq 1$ мс), что является важным, например, в фотокристаллографии [3], исследованиях влияния протокола варьирования давления на фазовые превращения [4] и др.

Реализация методики РСА на отдельной станции является важной по нескольким причинам. Необходима особая система окружения образца, включающая в себя специализированные гониометр, детектор, камеры для контроля температуры, давления, атмосферы, в которых находится образец, систему управления экспериментом и его обработки, оптимизированную для работы с монокристаллами и синхротронным излучением. Одним из ключевых элементов станции является комбинация оптических элементов, позволяющая получить монохроматический и сфокусированный пучок СИ. На стациях первой очереди ЦКП «СКИФ» 1-1 «Микрофокус» и 1-2 «Структурная диагностика» уже предполагается реализация метода РСА. Однако на станции 1-1 этот метод будет ориентирован на изучение высокобарических фаз геологических образцов, а на станции 1-2 — на определение структур белков и других макромолекул. Так как эти станции будут обеспечивать реализацию метода РСА лишь по нескольким узким направлениям, необходима отдельная станция для удовлетворения высокого спроса со стороны научных организаций и организаций реального сектора экономики (в том числе фармацевтических компаний) на такие эксперименты, который был подтвержден рядом организаций в ходе формирования портфеля научных задач станции. Также важным отличием станции «Монокристалл» от

станций 1-1 и 1-2 является использование излучения поворотного магнита вместо ондуляторного излучения, что позволит исследовать ряд образцов, чувствительных к радиационному разрушению, как это было продемонстрировано ранее, например, на примере фосфита глициния [5].

На основании опыта разработки аналогичных станций за рубежом (ESRF (Гренобль, Франция), DESY (Гамбург, Германия), SLS (Виллиген, Швейцария), Diamond (Дидкот, Великобритания) и др.) был предложен концепт станции, удовлетворяющий сформулированным выше требованиям и подразумевающий: 1) возможность изменять энергию монохроматического излучения в диапазоне 10–30 кэВ для использования и исследования эффектов аномального рассеяния, и получения карт электронной плотности высокого разрешения; 2) возможность фокусировки пучка до размеров ~1 мкм для определения структуры монокристаллов малых размеров; 3) наличие системы контроля, возможность изменения интенсивности (для избегания радиационного повреждения образца) и положения пучка (мониторы интенсивности и положения пучка, набор фильтров ослабления интенсивности); 4) возможность использования белого пучка для реализации времяразрешенных экспериментов методом Лауэ. Была проведена трассировка рентгеновских лучей основных «рабочих» энергий с использованием программного обеспечения XRT [6], определены положение, размеры и тепловые нагрузки на оптические элементы станции.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] Giordano N. et al. High-pressure polymorphism in l-threonine between ambient pressure and 22 GPa //CrystEngComm. – 2019. – Т. 21. – №. 30. – С. 4444-4456.
[2] Zakharov B. A., Goryainov S. V., Boldyreva E. V. Unusual seeding effect in the liquid-assisted high-pressure polymorphism of chlorpropamide //CrystEngComm. – 2016. – Т. 18. – №. 29. – С. 5423-5428.
[3] Raithby P. R. Time-resolved single-crystal X-ray crystallography //21st Century Challenges in Chemical Crystallography I: History and Technical Developments. – Cham: Springer International Publishing, 2020. – С. 239-271.
[4] Zakharov B. A., Tumanov N. A., Boldyreva E. V. β-Alanine under pressure: towards understanding the nature of phase transitions //CrystEngComm. – 2015. – Т. 17. – №. 10. – С. 2074-2079.
[5] Bogdanov N. E. et al. Phase transition in an organic ferroelectric: glycinium phosphite, with and without X-ray radiation damage //Structural Science. – 2021. – Т. 77. – №. 3. – С. 365-370.
[6] Klementiev K., Chernikov R. Powerful scriptable ray tracing package xrt //Advances in computational methods for X-ray optics III. – SPIE, 2014. – Т. 9209. – С. 60-75.

СД-I-08

Эскизный проект станции 2-ой очереди «Люминесцентная спектроскопия с временным разрешением»

Завьялов А.П.[1], Пустоваров В.А.[2], Каменских И.А.[3], Ивановских К.В.[4], Мешков О.И.[5], Косьянов Д.Ю.[6]

1 – Отдел синхротронных исследований, ЦКП "СКИФ", Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия

2 – Кафедра экспериментальной физики, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

3 – Кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

4 – Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» им. Н.П. Сажина, Москва, Россия

5 – Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

6 – НОЦ «Передовые керамические материалы», Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

Zav_Alexey@list.ru

Проектируемая станция предназначена для исследования электронной структуры, процессов создания и релаксации электронных возбуждений и носителей заряда, транспорта энергии в диэлектриках и широкозонных полупроводниках с применением спектроскопических методик с временным разрешением.

Прикладное значение станции заключается в проведении экспериментальных исследований при разработке новых конверторов излучений различного спектрального диапазона, быстрых детекторов ионизирующих излучений для медицинской диагностики, ядерной физики и астрофизики, материалов для задач УФ и радиационной фотоники, светотехники, катализа, решение широкого круга задач в области разработки и аттестации материалов для микро- и наноэлектроники, оптоэлектроники, УФ-ВУФ литографии и других смежных направлений, диагностика и контроль приповерхностных дефектов в нелинейно-оптических и лазерных кристаллах и влияние локальной плотности возбуждения на структуру и закономерности их формирования, разработка и исследование ап- и даун-конверсионных материалов, а также даун-шифтеров для фотовольтаики, исследование и разработка люминофоров и конверторов излучений на основе квантовых точек, проведение исследований в области радиационного материаловедения и дефектообразования для задач разработки новых материалов для специальных условий эксплуатации (атомная энергетика, космические применения, и др.).

Первоначальная концепция станции [1] была сформулирована с учётом рассмотрения и опыта эксплуатации соответствующих мировых аналогов, использующих монохроматический пучок СИ рентгеновского диапазона на канале BW3 (HASYLAB, DESY) [2], ВУФ диапазона на станции Superlumi на канале I накопителя DORIS III (HASYLAB, DESY) [3] или обоих диапазонов на станции FINESTLUMI накопителя MAX IV (Lund, Sweden) [4, 5], а также действующей станции «Люминесценция с временным разрешением» на канале 6-Б накопителя ВЭПП-3 (ЦКП СЦСТИ, ИЯФ СО РАН, Новосибирск, Россия) [6].

В настоящий момент рабочей группой, прорабатывающей представляемый проект станции, сделан выбор в пользу использования СИ диапазона ВУФ для возбуждения образцов. Для очень широкого класса материалов селективное возбуждение в ВУФ-области и постановка время-разрешённых экспериментов позволит проводить выборочное исследование различных каналов релаксации и получать комплексную информацию об их энергетической структуре. Опираясь на опыт работы действующей станции в ЦКП СЦСТИ [6],

также предусматривается возможность возбуждения «розовым» ВУФ широкого диапазона. Выбор ВУФ диапазона определяет тип устройства генерации СИ – слабопольный поворотный магнит накопительного кольца [7].

Основным инструментом для исследования кинетики затухания люминесценции будет диссектор, прекрасно зарекомендовавший себя на станции в ЦКП СЦСТИ [6], но его современная модель с временным разрешением ~2–4 пс, использующаяся для исследования временного профиля банчей по СИ, генерируемому в поворотных магнитах накопительного кольца СКИФ, длительностью ~15 пс. Выбор материала фотокадода в диссекторе позволяет получить устройство исследования кинетики с приемлемым коэффициентом усиления в различных диапазонах от ~200 до ~900 нм. Дополнительной сложностью при исследовании кинетики затухания является многобанчевая временная структура пучка электронов в накопителе – до 255 банчей с промежутком ~6.2 нс. Для станции люминесценции на MAX IV, чтобы не мешать работе других станций СИ, вместо однобанчевого режима предлагается использовать излучение СИ от банча, находящегося на отличной от основной орбите – «псевдооднобанчевый режим» [8]. Аналогичный подход предлагается реализовать и в представляемой станции. Таким образом, функциональные возможности станции включают:

– измерение спектров стационарной люминесценции и возбуждения (и построение карт «возбуждение-излучение») в диапазоне 105–1500 нм с высоким спектральным разрешением и интегральной спектральной интенсивности при селективном возбуждении ВУФ 12,5–400 нм или возбуждении «розовым» ВУФ, в том числе с временной задержкой относительно импульса СИ на 0.5–500 нс;

– измерение кинетики затухания люминесценции во временном диапазоне до ~1500 нс после импульса возбуждения на выбранной линии в некотором диапазоне в пределах от ~200 до ~900 нм при селективном ВУФ 12,5–400 нм возбуждении или возбуждении «розовым» ВУФ;

– измерение спектров ВУФ 12,5–400 нм пропускания (поглощения) и отражения при заданном угле (с возможностью скола кристалла непосредственно в вакууме и, в том числе, при угле падения СИ близкому к нормальному);

– проведение экспериментов при фиксированной температуре 5–500 К и измерение температурных зависимостей при различных схемах постановки эксперимента;

– возможность дооснащения и проведение экспериментов по двухфотонному возбуждению с применением настраиваемого лазера в диапазоне ~410 – 2500 нм (типа YAG + OPO).

Проектируемая станция станет уникальной экспериментальной платформой для исследования динамики электронных возбуждений и дефектообразования в широком классе материалов с использованием ВУФ-синхротронного излучения и позволит значительно расширить спектр доступных экспериментов на источнике СКИФ, а также обеспечит новые возможности для фундаментальных и прикладных исследований в области фотоники, оптики, материаловедения и ядерных технологий.

Благодарности: Работа была выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] Пустоваров В.А. Иванов В.Ю. // Технологическая инфраструктура «СКИФ». 2022. Т.3. Статья 3-10.
[2] Moller T. // Synchrotron Radiation News. 1993. V.6. P.16-18.
[3] Zimmerer G. // Radiation Measurements. 2007. V.42. P.859-864.
[4] Pankratov V., Pëarna R., et al. // Radiation Measurements. 2019. V.121. P.91-98.
[5] Pärna R., Sankari R., et al. // Nucl. Instr. Meth in Phys. Res.. 2017. V.A859. P.83-89.
[6] Pustovarov V.A., Zinin E.I., et al. // Review of Scientific Instruments. 1992. V.63. № 6. P.3521-3523.
[7] Пользовательская Инфраструктура ЦКП «СКИФ». 2025.
[8] The FinEstBeAMS beamline team // FinEstBeAMS beamline review report. September 2022.

СД-I-09

Быстродействующий пьезоэлектрический экспозиционный затвор для пучков синхротронного излучения высокой яркости поколения 4+

Завьялов П.С.[1,2], Скоков Д.В.[2], Кравченко М.С.[2], Карпов Д.В.[1,2], Кутькин О.М.[1], Завьялова М.А.[1,2], Денежкин Е.Н.[1]

1 – Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

2 – Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН, Новосибирск, Россия

karpden@inbox.ru

Для современных источников синхротронного излучения (СИ) поколения 4+, таких как «СКИФ», критически важны устройства, позволяющие точно дозировать энергию, подаваемую на образец. Высокая плотность мощности пучка СИ может вызывать необратимые повреждения исследуемых материалов и детекторов. Существующие затворы часто не удовлетворяют требованиям по быстродействию, надежности и возможности работы в условиях сверхвысокого вакуума и значительных тепловых нагрузок.

В работе описана разработка и экспериментальное исследование вакуумного быстродействующего экспозиционного затвора на примере работы [1], способного подавлять интенсивность монохроматического пучка СИ на 5 порядков (до 0,001%) со временем срабатывания не более 10 мс.

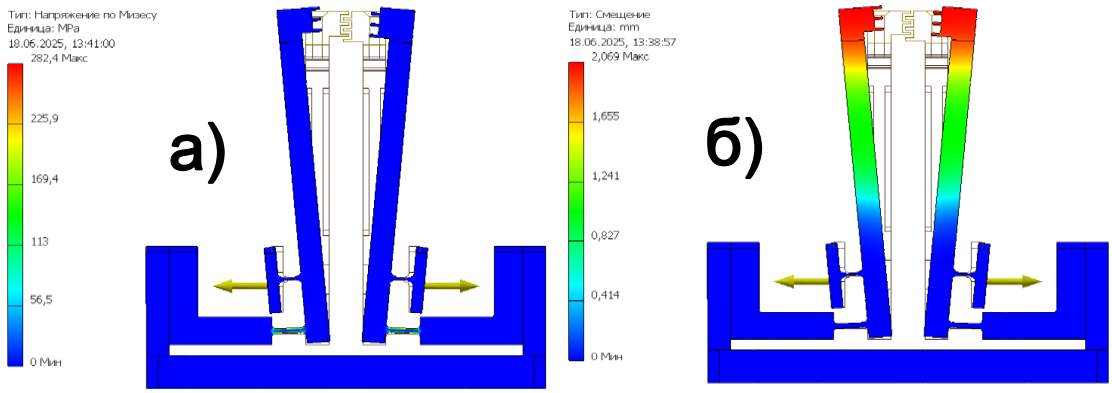


Рис. 1. Параметрический анализ конструкции затвора в программном продукте компании Autodesk Inventor Professional: а) максимальные напряжения в рычагах; б) смещение рычагов

Разработанный затвор состоит из двух независимых рычагов с медными ножами, перекрывающими пучок апертурой до 3×3 мм. Привод осуществляется с помощью усиленных пьезоэлектрических актюаторов (X axis 400A5), что исключает наличие трущихся частей, подшипников и смазки, обеспечивая работу в вакууме и высокую надежность (миллионы циклов). Методом параметрического анализа в Autodesk Inventor Professional [2] в качестве материала рычагов выбрана бериллиевая бронза БрБ2, обеспечивающая требуемую упругую деформацию (2 мм при усилии 16 Н) с запасом прочности (макс. напряжение 282 МПа при допустимых 590-930 МПа), что показано на рисунке 1.

На основе закона Бугера-Ламберта-Бера рассчитаны [3] и рекомендованы толщины ножей из различных материалов (Mo, Ta, Cu, сплав BD-10) для подавления пучка на 5 порядков

в диапазоне энергий 10-30 кэВ. Для прототипа выбрана медь как легкообрабатываемый материал.

Для исследования динамики работы затвора использовалась высокоскоростная видеосъемка (камера NOVA fastcam S-series, 4000 кадр/с). Испытано 10 режимов работы для операций открытия и закрытия, различающихся шагом изменения напряжения (от 17 до 85 В), количеством шагов (от 2 до 10) и задержкой между шагами (1 или 2 мс).

Затвор обеспечивает полный ход рычагов 3,5 мм. Время механического перемещения ножей в оптимальных режимах составило 6,25 мс для открытия и 8,25 мс для закрытия, что укладывается в требование ТЗ (меньше 10 мс). Основной проблемой оказались остаточные колебания рычагов после остановки (до 160 мс). В ходе экспериментов выявлены оптимальные режимы работы, при которых последующие шаги управления совпадают по фазе с собственными колебаниями системы, эффективно их гася.

Наилучшие результаты показал режим с тремя шагами по 56 В и задержкой 1 мс между шагами, обеспечивающий малое время срабатывания и минимальные последующие колебания.

Разработан, изготовлен и испытан прототип быстродействующего вакуумного затвора для пучков СИ. Конструкция на основе пьезоактюаторов и упругих рычагов доказала свою эффективность. Подбором режимов управления (амплитуда и временные интервалы между шагами) удалось не только достичь требуемого быстродействия (менее 10 мс), но и значительно подавить паразитные колебания. Разработанный затвор готов к интеграции в состав станций источника СИ «СКИФ» для защиты образцов и прецизионного управления экспозицией.

Благодарности: Работа выполнена в ФГОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет» при финансовой поддержке Министерства высшего образования и науки РФ (программа «Приоритет-2030»).

Литература:

[1] Bowden W. et al. Note: A high-performance, low-cost laser shutter using a piezoelectric cantilever actuator //Review of Scientific Instruments. – 2017. – Т. 88. – №. 1.

[2] Большаков В., Бочков А., Лячек Ю., Твердотельное моделирование деталей в CAD системах: AutoCAD, Компас-3В, SolidWorks, Inventor, Creo. Учебный курс. Питер. 2015, 250 с.

[3] Henke B. L., Gullikson E. M., Davis J. C. X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at E= 50-30,000 eV, Z= 1-92 //Atomic data and nuclear data tables. – 1993. – Т. 54. – №. 2. – С. 181-342.

СД-I-10

Разработка мониторов положения пучка на основе люминесценции синтетических алмазов для источников СИ поколения 4+

Карпов Д.В.[1,2], Завьялов П.С.[1,2], Власов Е.В.[1], Ермоленко А.В.[1], Макаров С.Н.[1], Белоусов А.П.[1], Кузнецов С.В.[3], Седов В.С.[3], Купер К.Э.[4]

1 – Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

3 – Институт общей физики имени А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия

4 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа имени Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

karpden@inbox.ru

Для современных и перспективных источников синхротронного излучения (СИ) поколения 4+, таких как «СКИФ», критически важна высокоточная и неинвазивная диагностика параметров пучка. Традиционные методы мониторинга положения пучка имеют существенные недостатки, такие как инвазивность, радиационная деградация и сложность эксплуатации [1]. Люминесцентные мониторы положения (ЛМП) на основе синтетических алмазов представляют собой перспективную альтернативу, обладающую высокой радиационной стойкостью и пригодностью для работы в условиях сверхвысокого вакуума [2].

Была предложена и реализована схема с перпендикулярным расположением люминесцентного экрана относительно пучка СИ и использованием плоского поворотного зеркала для наблюдения свечения (рис. 1). Это решение минимизирует поглощение излучения в экране по сравнению с традиционными схемами с наклоном в 45° и обеспечивает защиту камеры от рассеянного рентгеновского излучения.

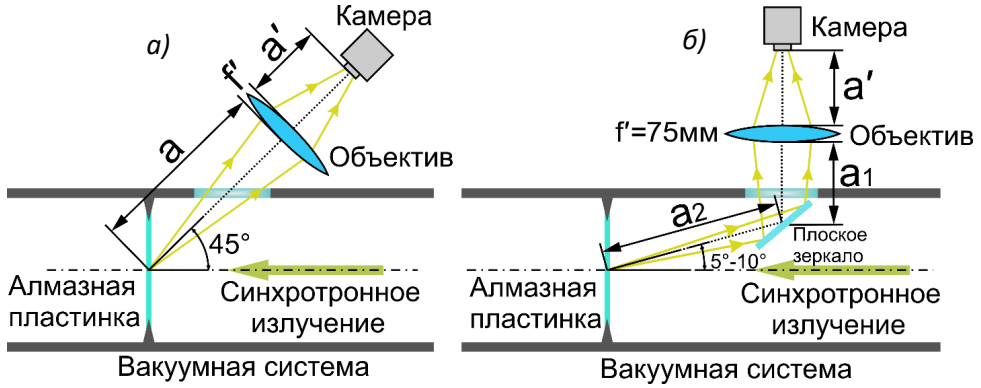


Рис. 1. Схематичное изображение исследуемых оптических схем ЛМП. Без зеркальная (а) и зеркальная (б) варианты схем ЛМП

Было проведено сравнительное исследование люминесцентных свойств трех типов синтетических алмазов: выращенных методом высокого давления и высокой температуры (HPHT); выращенных методом химического осаждения из газовой фазы (CVD); CVD алмазов, допированных люминофором на основе иттрий-алюминиевого граната, допированного церием (YaG:Ce) [3]. Разрешающая способность разработанного устройства согласно требованиям должна составлять не более 10 мкм/пиксель, которая определялась на лабораторном стенде с использованием лазерного светодиода и регулируемой щели.

Координаты центроида вычислялись как первые математические моменты распределения интенсивности. Испытания рабочего прототипа ЛМП с алмазными экранами проведены на источнике СИ ВЭПП-3 в ИЯФ СО РАН им. Г.И. Будкера при интегральной мощности белого пучка СИ порядка 15 Вт.

Для разработанного ЛМП достигнуто разрешение 7,658±0,084 мкм/пиксель, что превышает требуемые 10 мкм/пиксель. Наилучшую однородность люминесценции продемонстрировал экран из CVD алмаза, допированного люминофором (YaG:Ce) (рис. 2). Был разработан алгоритм нормализации светового поля [4] для компенсации неоднородности свечения экрана и повышения точности определения центроида пучка, что позволило почти в 30 раз снизить абсолютную погрешность определения положения центроида, вызванную неоднородностью экрана.

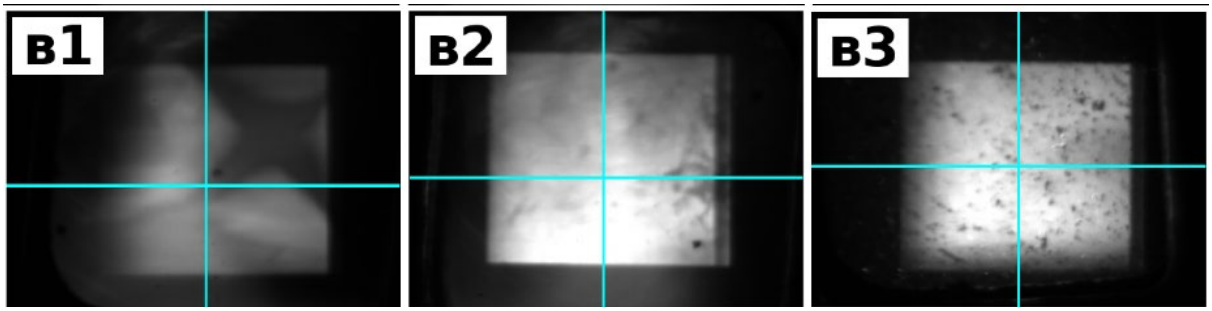


Рис. 2. Найденные центроиды карт интенсивностей HPHT (в1), CVD (в2) и допированного CVD (в3)

Разработан и успешно испытан прототип люминесцентного монитора положения пучка СИ. Конструкция с перпендикулярным экраном и зеркалом доказала свою эффективность. Допированный CVD алмаз показал себя как наиболее перспективный материал для экрана. Разработанный алгоритм обработки изображений значительно повысил точность измерений. Созданный ЛМП соответствует всем предъявляемым требованиям и готов к интеграции в состав фронтендов станций источника СИ «СКИФ» для проведения прецизионных экспериментов.

Благодарности: Исследования в части разработки CVD алмазов, допированных иттрий алюминиевым гранатом, легированным церием, выполнены за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00401-П, https://rscf.ru/project/22-13-00401/. Авторы благодарят А.К. Мартьянова и И.А. Тяжелова за помощь в подготовке образцов.

Литература:

[1] Фетисов Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. / Под редакцией Л. А. Асланова. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. — 672 с. — ISBN: 978-5-9221-0805-8

[2] Design of Monochromatic and White Beam Fluorescence Screen Monitors for XAIRA Beamline at the ALBA Synchrotron / J.M. Álvarez, C. Colldelram, N. González [et al] // Mechanical Engineering Design of Synchrotron Radiation Equipment and Instrumentation. – 2020. – MEDSI2020. – C. 249-251. – ISBN: 978-3-95450-229-5, ISSN: 2673-5520, DOI: 10.18429/JACoW-MEDSI2020-WEPA11

[3] Luminescent diamond composites / Vadim Sedov, Sergei Kuznetsov, Artem Martyanov, Victor Ralchenko // Functional Diamond. – 2022. – Т. 2, № 1. – С. 53-63. – DOI: 10.1080/26941112.2022.2071112

[4] Dynamic intensity normalization using eigen flat fields in X-ray imaging / Vincent Van Nieuwenhove, Jan De Beenhouwer, Francesco De Carlo [et al] // Optics Express. – 2015. – Т. 23, № 21. – С. 27975-27989. – DOI: 10.1364/OE.23.027975

СД-I-11

Концептуальный дизайн и основные экспериментальные методы станции «УРАЛ» в мягком рентгеновском диапазоне

Кузнецова Т.В.[1,2], Терещенко О.Е.[1,3,4], Голяшов В.А.[3,4], Бухтияров А.В.[4], Кузнецов М.В.[5], Зубавичус Я.В.[4]

1 – ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

2 – Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

3 – ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия

4 – ЦКП СКИФ, Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

5 – ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

kuznetsova@imp.uran.ru

Представлен проект универсального экспериментального канала «УРАЛ» на синхротронном комплексе «СКИФ». Станция предназначена для формирования структур и тонких пленок и исследования электронной и атомной структуры, локальных электронных характеристик функциональных материалов в мягком рентгеновском диапазоне 50–2000 эВ. В качестве источника излучения предлагается использовать поворотный магнит накопителя. Приведено описание параметров станции и основных методов, реализуемых на ней. Предлагается разработать и впоследствии внедрить новый перспективный метод исследования локальной проводимости полупроводниковых структур и тонких пленок с использованием рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии с использованием лазера. Лазерно-индуцированная фотопроводимость обеспечивает быструю релаксацию возбужденных состояний в полупроводниковых структурах, что проявляется в сдвиге энергии связи внутренних уровней, вследствие чего может быть получена информация о накоплении заряда на материалах или поверхностных структурах. К ним относятся как постоянное, так и переменное электрическое или оптическое воздействие в широком диапазоне частот для зондирования зарядовых фотоэлектронных сдвигов, обусловленных примесями, легирующими примесями, дефектами и т.д. Данный метод обладает огромным потенциалом и в настоящее время используется лишь в нескольких зарубежных лабораториях, где синтезируются и исследуются полупроводниковые структуры и материалы для солнечных батарей. Описан круг научных, технических и прикладных задач, которые предстоит решить сообществу пользователей станции. Показаны функциональные экспериментальные возможности планируемой станции и возможные методы формирования тонких пленок. Описаны требования к каналу транспортировки пучка, монохроматору, детекторам и измерительной камере. Приведены технические параметры станции, обозначены возможные задачи для науки и промышленности, которые могут быть реализованы на данной станции.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект №23-72-00067.

СД-I-12

Разработка двухкристального монохроматора с меридиональным изгибом для станции 1-5 ЦКП «СКИФ»

Макаров С.Н.[1], Скоков Д.В.[1], Довженко Г.Д.[2], Купер К.Э.[2]
1 – Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа имени Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
msn@tdisie.nsc.ru

Ключевыми методиками реализуемыми на станции 1-5 ЦКП «СКИФ» «Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне» являются рентгеновская микроскопия и томография. Приложения этих методик, в особенности биомедицинские, выигрывают от использования широких монохроматических пучков СИ с высоким потоком фотонов. Типичным и многократно апробированым устройством для формирования таких пучков является двухкристальный монохроматор в геометрии Лауэ с меридиональным изгибом (ДКЛМ) [1].

Для эффективного решения научных задач станции 1-5, монохроматор должен работать с диапазоном энергий фотонов 30-150 кэВ. Высокоэнергетическое излучение и длинные плечи оптической системы (33 м до источника и 82 м до образца) предъявляют серьёзные требования к системе позиционирования кристаллов. В качестве источника высокоэнергетических фотонов на кольце ЦКП «СКИФ» применяется вигглер, имеющий высокую полную мощность пучка СИ, что приводит к проблема отвода поглощённого тепла с первого кристалла ДКЛМ.

1 Общее описание

Меридиональный монохроматор состоит из двух кристаллов монокристаллического кремния с ориентацией плоской поверхности (100), см. рис. 2. Первый кристалл (1) – охлаждаемый и имеет толщину 1.8 мм. Второй кристалл (2) неохлаждаемый и имеет толщину 2.2 мм.

Монохроматор преобразует падающий на первый кристалл (1) входной полихроматический («белый») пучок СИ (4), в выходной монохроматический пучок (5), смещенный на 25 мм по отношению к оси входного пучка (4). Меридиональный изгиб каждого из кристаллов осуществляется при помощи индивидуального механического интерфейса (3), вокруг горизонтальной оси перпендикулярной направлению распространения пучка СИ, выполняемый. Положение и каждого из кристаллов управляется задается Гексаподами (6), с целью юстировки оптической схемы при перестройке энергии выходного пучка и сохранения направления выходного пучка 5.

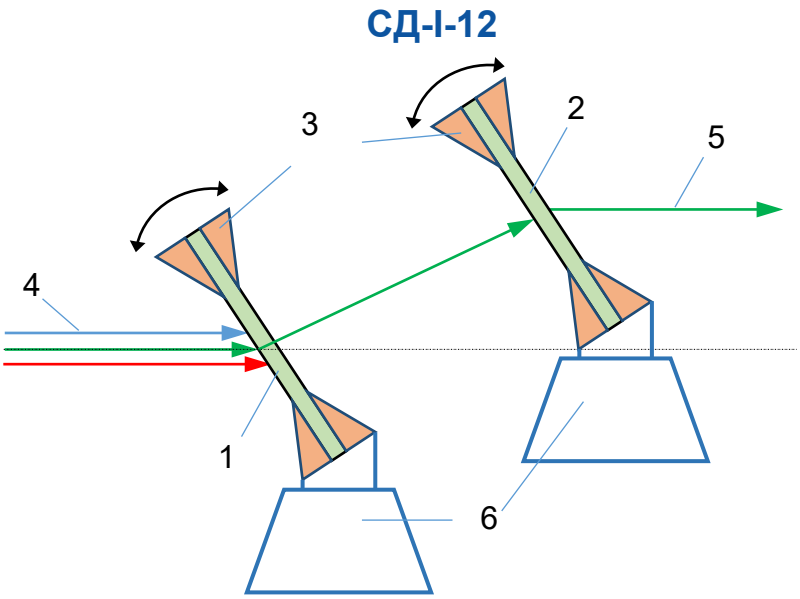


Рисунок 1 – принципиальное устройство меридионального монохроматора.

2 Результаты теплового моделирования для входного пучка СИ с полной апертурой

Температурная карта поверхности первого кристалла, облучаемого пучком СИ с полной апертурой 2 x 0.2 мрад, для станции СКИФ 1-5, приведена на рис. 4. Данный режим является предельным по теплонагруженности первого кристалла монохроматора: полная мощность падающего пучка СИ – 3.8 кВт; поглощаемая и кристаллом тепловая мощность – 0.890 кВт; пиковая температура кристалла – 315 °C; пиковое напряжение сжатия в материале кристалла (по критерию фон Мизеса) – 101 МПа, пиковое напряжение на разрыв в материале кристалла – 75 МПа.

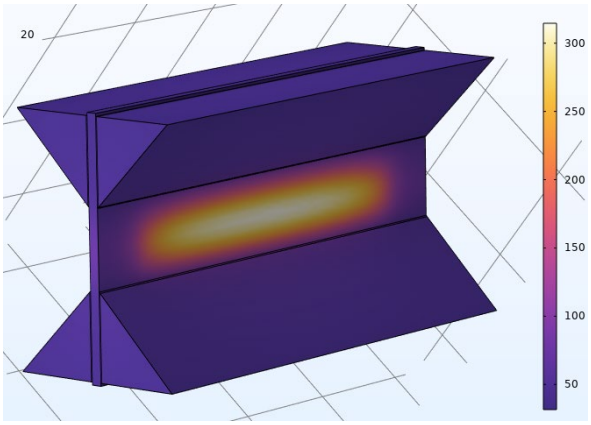


Рисунок 2 – Температурная карта поверхности первого кристалла монохроматора, облучаемая пучком СИ полной апертуры, °C.

3 Заключение

Предлагаемое техническое решение для меридионального монохроматора, позволяет применять кремниевые кристаллы, имеющие простую форму поверхности, при этом позволяющие реализовать монохроматор для пучков СИ полной апертуры (2 x 0.2 мрад) с максимальной мощностью до 4 кВт с целью применения его в станции СКИФ 1-5.

Литература:

[1] Martinson M. [и др.]. Characterization of a bent Laue double-crystal beam-expanding monochromator // Journal of Synchrotron Radiation. 2017. № 6 (24). С. 1146–1151.

[2]. Tomasz W. Wysokinski, Michel Renier, Pekka Suortti, George Belev, L´eo Rousset, Madison Adam, Denise Miller, Norman Huber, and L. Dean Chapman. High-power-load dclm monochromator for a computed tomography program at bmit at energies of 25–150 kev. Journal of Synchrotron Radiation, 25:1548–1555, 9 2018.

СД-I-13

Применение люминесцентных материалов для визуализации пучка синхротронного излучения

Токарев Д.С.[1], Мостовщиков А.В.[1,2], Гольденберг Б.Г.[3]
1 – Национальный Исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
2 – Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, Россия
3 – ЦКП «СКИФ», Новосибирск, Россия
avmost@tpu.ru

Люминесцентные материалы охватывают широкую область применения, они являются неотъемлемой частью многих осветительных приборов, дозиметров, детекторов рентгеновского и ионизирующего излучения, применяемых в медицине и атомной отрасли. Для визуализации высокоэнергетического электромагнитного излучения используются рентгенолюминофоры. В отличие от фотолюминофоров механизм преобразования поглощенной энергии происходит при воздействии на люминофор фотоэлектронов или комптон-электронов, образуемых в материале при воздействии на него рентгеновского излучения. Коэффициент поглощения рентгеновского излучения существенно зависит от зарядового числа атомов вещества, это приводит к явной зависимости эффективности возбуждения люминесценции от применяемого материала матрицы люминофора, что в свою очередь делает предпочтительным использование составов с тяжелыми химическими элементами для синтеза рентгенолюминофоров [1].

Поскольку спектр пучка синхротронного излучения представлен широким диапазоном электромагнитного излучения для визуализации излучение возможно рассмотрение также фотолюминесцентных люминофоров, возбуждаемых в ближнем УФ диапазоне.

Для оценки эффективности визуализации пучка синхротронного излучения люминофорами различных энергий возбуждения в работе был подготовлен ряд люминесцентных составов, включающий представителей групп вольфраматов ($ZnWO_4$, $MgWO_4$, $ZnWO_4$:Dy), молибдатов ($CaMoO_4$), силикатов ($ZnSiO_3$:Mn), и алюминатов ($CaAl_4O_7$:Mn). Все составы получены с применением метода твердофазного синтеза. Стоит отметить, что в группе вольфраматов подготовлен $ZnWO_4$ легированный диспрозием с мольной долей 5%, что позволяет придать цвету материала более выраженное белое свечение [2].

Согласно данным проведенного спектрофлуорисцентного анализа длина волны возбуждения полученных вольфраматных, молибдатных и силикатных групп лежит в диапазоне 240-325 нм, в то время как наибольшая интенсивность люминесценции $CaAl_4O_7$:Mn проявляется при воздействии излучения в диапазоне длин волн 355-465 нм.

Для оценки возможности визуализации синхротронного излучения полученные составы были нанесены на алюминиевые пластинки тонким слоем и зафиксированы на них с помощью силикатного клея. После, пластинки с нанесенными составами подвергались воздействию синхротронного излучения. Результат воздействия представлен на рисунке 1.

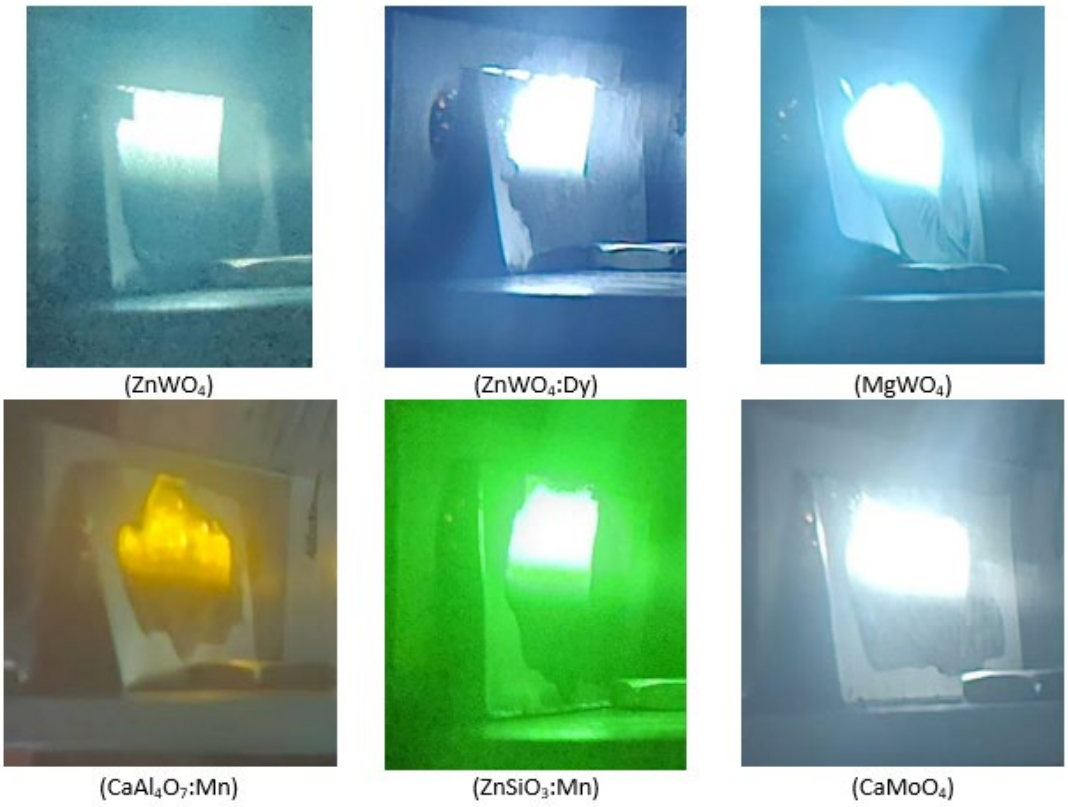


Рис.1. Воздействие пучка синхротронного излучения на люминесцентные материалы

Как видно из рисунка 1 все исследуемые люминофоры реагируют на воздействие пучка синхротронного излучения. Группы вольфраматов и молибдатов имеют преимущественно белое интенсивное свечение, силикат цинка, легированный марганцем, проявляет типичное для него зеленое интенсивное свечение. Образец с нанесенным $CaAl_4O_7$:Mn проявляет тусклое желтое свечение, что свидетельствует о недостаточности охватываемого энергетического диапазона пучка для возбуждения данного типа люминофора. Результат работы свидетельствует о том, что визуализация пучка возможно как на рентгенолюминофорах, так и на фотолюминофорах, возбуждаемых ближним УФ диапазоном поддиапазонов UVB (280-315 нм) и UVC (200-280 нм).

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2023-0003).

Литература:

[1] Мурашкевич, А. Н. Технология неорганических люминофоров: учеб. пособие для студентов специальности «Химическая технология неорганических веществ, материалов и изделий» : в 2 ч.– Минск : БГТУ, 2021. – Ч. 1. – 114 с.

[2] Dabre K. V., Dhoble S. J. Photoluminescence properties of ZnWO4: Dy 3+ phosphor //Recent Research in Science and Technology. – 2012. – Т. 4. – №. 8.

СД-I-14

Эскизный проект станции второй очереди «Спектроскопия и метрология мягкого рентгеновского диапазона»

Дмитриев А.М.[1,3], Золотарев К.В.[1,2], Забродский В.В.[4], Кузин С.В.[5], Николенко А.Д.[1,2,6], Федоренко А.Д.[7], Платунов М.С.[1], Шмаков А.Г.[3], Папко С.С.[1,6]

1 – ЦКП СКИФ, Кольцово, Россия

2 – ИЯФ СО РАН, Новосибирск, Россия

3 – ИХКиГ СО РАН, Новосибирск, Россия

4 – ФТИ РАН, Москва, Россия

5 – ИСЗФ СО РАН Иркутск, Россия

6 – НГТУ, Новосибирск, Россия

7 – ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия

a.d.nikolenko@inp.nsk.su

Станция предназначена для проведения широкого круга метрологических работ и реализации ряда спектроскопических методик в диапазоне энергий фотонов 500 – 8 000 эВ. Названный диапазон покрывается благодаря использованию двух типов монохроматоров: двухкристального (Si(111), поддиапазон 2 000 – 8 000 эВ, спектральное разрешение $E/\Delta E \approx 10^4$) и гибридного «кристалл+многослойное зеркало» (поддиапазон 500 – 3 000 эВ, $E/\Delta E \approx 10^4$). В перечень метрологических задач входит калибровка различного рода детекторов, пропускания рентгеновских фильтров, коэффициентов отражения различных отражающих элементов и т.д. Спектроскопические задачи включают с себя измерение XAFS и эмиссионных спектров. Наличие возможности проводки в экспериментальный объем «розового» или «белого» пучка СИ дает позволит расширить спектр доступных методик, в частности, даст возможность изучать радиационную стойкость детекторов. Также на шасси гибридного монохроматора будет предусмотрена возможность установки многослойных зеркал. Имеющийся набор многослойных зеркал позволяет покрыть поддиапазон, соответствующий ультрамягкому рентгену (30-3000 эВ, $E/\Delta E \approx 10^1 \div 10^3$). Такое спектральное разрешение не позволит применять методики спектроскопии высокого разрешения, однако обеспечивает возможность проведения многих метрологических работ.

Кроме того, ожидается, что на станции также будет установлен монохроматор на основе VLS решетки, позволяющий проводить подобные работы в ВУФ диапазоне (5-100 эВ, $E/\Delta E \approx 10^3 \div 10^4$). Дополнительные задачи этого диапазона позволят изучать кинетику горения методами фотоионизационной масс-спектрометрии. Специализированная установка, реализующая данный метод также включена в состав станции. Все монохроматоры располагаются на оси пучка СИ, и вводятся в него по очереди, в зависимости от решаемой задачи. Станция использует излучение из низкопольного поворотного магнита накопителя СКИФ.

Особенностью предложенного проекта является использование ряда узлов, которые в настоящее время входят в состав действующей станции СИ «Космос», которая в настоящее время функционирует на поворотном магните накопителя ВЭПП-4 в ИЯФ СО РАН. Такой подход позволяет существенно снизить финансовые и временные затраты на создание станции. В докладе представлены оптическая схема станции, параметры всех ее основных элементов и результаты расчетов основных их характеристик.

СД-I-15

Моделирование распространения ограниченных импульсов синхротронного излучения в дифракционных оптических элементах

Орешко А.П.
МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
oreshkoap@my.msu.ru

Конструирование, разработка и оптимизация рентгеновских оптических элементов для исследовательских станций источников синхротронного излучения практически невозможно без программного обеспечения, позволяющего проводить корректные вычисления распространения рентгеновского излучения с ограниченным волновым фронтом в свободном пространстве и через различные дифракционные оптические элементы.

В настоящей работе на основе развитой ранее общей теории динамической дифракции рентгеновских импульсов с произвольной пространственно-временной структурой и поляризацией поля в совершенных кристаллах [1] создан программный комплекс для моделирования структуры поля рентгеновских импульсов на наперед заданных расстояниях от кристаллов-монохроматоров, щелей и отверстий в диэлектрических экранах, а также любых комбинаций этих дифракционных элементов. Используемый подход позволяет не только анализировать пространственно-временную структуру дифрагированных импульсов, но и степень их пространственной и временной когерентности.

Программный комплекс реализуется как полностью автономный отдельный модуль, написанный на языке *Fortran* 90.

При моделировании амплитуда и фаза падающего импульса задаются на входной поверхности первого кристалла-монохроматора/экрана, каждый дифракционный элемент описывается набором стандартных параметров (для щели/отверстия – ширина/диаметр, монохроматора – материал, индекс отражения, расстояния между элементами и их положения относительно оси падающего импульса).

Одной из серьезных проблем при практической реализации предлагаемого в данной подхода является правильный выбор пределов интегрирования в преобразованиях Фурье волновых полей. Для контроля этой проблемы, в программе проводится сравнение действительной и мнимой частей поля падающего импульса с действительной и мнимой частями поля того же импульса, полученными в результате прямого и обратного преобразования Фурье и пользователю предоставляется возможность самому выбирать максимальное значение разницы между указанными выше действительными и мнимыми частями в соответствии с собственными пожеланиями и видом исходных функций.

Благодарности: Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература:

[1] Бушуев В.А., Орешко А.П. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2007. № 5. С. 21-27.

СД-I-16

Детектор спина электронов с пространственным разрешением на основе ферромагнитных мембран

Петякина А.С.[1,2], Голяшов В.А.[1,2,3], Бакин В.В.[1], Степанов С.А.[3], Кустов Д.А.[1], Русецкий В.С.[1,4], Рожков С.А.[1,3], Шайблер Г.Э.[1,3], Демин А.Ю.[4], Терещенко О.Е.[1,2,3]

1 – Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – ЦКП "СКИФ", р.п. Кольцово, Россия

3 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

4 – АО “ЭКРАН ФЭП”, Новосибирск, Россия

mikaeva@isp.nsc.ru

Создание высокоэффективного детектора спина свободных электронов с пространственным разрешением представляет большой интерес для развития метода фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением (SARPES), который позволяет напрямую изучать электронную и спиновую структуру кристаллических материалов и широко используется в современных исследованиях в области физики твердого тела. Цель данной работы – продемонстрировать возможность использования свободновисящих ферромагнитных (ФМ) мембран для фильтрации пучков электронов по спину и детектирования их спиновой поляризации с пространственным разрешением.

В работе предложена оригинальная конструкция спинового детектора с пространственным разрешением [1]: тонкая свободновисящая наномембрана, состоящая из поддерживающего слоя SiO_2 или Al_2O_3 и ферромагнитной сверхрешетки [Co/Pt] с перпендикулярной магнитной анизотропией, была перенесена на лицевую сторону каналов микроканальной пластины (МКП) (Рис. 1). Для исследования спин-зависимого пропускания через наномембраны были изготовлены спин-триоды, состоящие из мультищелочного фотокатода, используемого в качестве источника спин-поляризованных электронов [2], МКП, покрытой ФМ-мембраной, и флуоресцентного экрана.

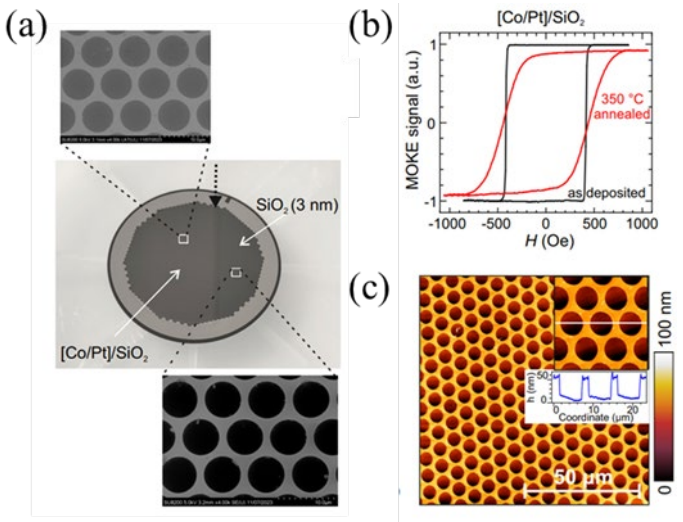


Рис. 1. (a) Фотография МКП с двумя типами покрытий. Снимки каналов, покрытых слоем SiO_2 (~3 нм) (нижнее изображение) и покрытых ФМ-мембраной [Co/Pt]/SiO_2 (верхнее изображение), полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа (вид сверху). (b) Петли магнитного гистерезиса для перпендикулярной составляющей намагниченности в сверхрешетке [Co/Pt] после осаждения (черная кривая) и после последующего отжига при 350 °C (красная кривая). (c) АСМ-изображение МКП, покрытого мембраной [Co/Pt]/SiO_2.

СД-I-16

Была продемонстрирована возможность изготовления низкодефектных ФМ мембран, состоящих из сверхрешетки [Co/Pt] толщиной 7 нм, нанесенной на свободновисящую пленку SiO_2 (или Al_2O_3) толщиной 3 нм. Измерение характеристик такого двумерного спинового фильтра в режиме прямой визуализации для использования спин-поляризованных электронов в различных спектроскопических методах показали, что при использовании МКП с диаметром активной части 19 мм, число независимых каналов спин-детектора составляет $\sim 10^6$, при этом для электронов с кинетическими энергиями ~ 1-2 эВ функция Шермана каждого канала составляет S = 0.4-0.6, а коэффициент прохождения $\sim 1.4\times10^{-3}$.

Интеграция изготовленных спиновых фильтров в сочетании со стандартной микроканальной пластиной в полусферический анализатор энергий электронов обеспечит возможность многоканального параллельного детектирования спина электронов в методе SARPES с одной из самых высоких на сегодняшний день двумерных эффективностей детектирования. В настоящее время проводятся эксперименты по внедрению спинового детектора с пространственным разрешением в установку фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением SPECS Proven-X ARPES в ИФП СО РАН. На текущем этапе работы создан прототип 2D спин-детектора с использованием шевронной сборки ФМ-МКП и стандартной МКП и с интегрированными магнитными катушками для изменения намагниченности ФМ мембраны, и получены спектры ФЭСУР. Устройство на основе ФМ-МКП обеспечивает компактный оптический метод измерения спиновой поляризации свободных электронных пучков с пространственным разрешением. Важной характеристикой спинового фильтра является его стоимость: она значительно ниже коммерчески доступных спиновых фильтров для 2D-визуализации, включая одноканальный детектор Мотта.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 25-62-00004.

Литература:

[1] O.E.Tereshchenko, V.V. Bakin, S.A. Stepanov, V.A. Golyashov, A.S. Mikaeva, D.A. Kustov, V.S. Rusetsky, S.A. Rozhkov, H.E. Scheibler, A.Yu. Demin // Phys. Rev. Lett. 134, 157002 (2025).
[2] V.S. Rusetsky, V.A. Golyashov, S.V. Eremeev, D.A. Kustov, I.P. Rusinov, T.S. Shamirzaev, A.V. Mironov, A.Yu. Demin, O.E. Tereshchenko// Phys. Rev. Lett. 129, 166802 (2022).

СД-I-17

Разработка устройства фиксации быстропротекающих процессов с легкосъемным матричным чувствительным элементом

Самсонов А.Н., Ведерников Е.Ф.
Институт гидродинамики СО РАН, Новосибирск, Россия
sams_alexandr@mail.ru

Авторами предлагается разработанный ими прибор для видеофиксации быстропротекающих процессов. Прибор обладает чувствительностью прежде всего в видимом диапазоне, поэтому предлагается установка люминофора[1] между источником синхротронного излучения и светочувствительной матрицей. Характеристики: размер пикселя составляет 13.7 мкм; разрешение — около 1 Мпикс.

Благодаря использованию КМОП-сенсора с глобальным затвором прибор имеет минимальное время экспозиции менее 1 мкс. Данные с прибора передаются на ПК по интерфейсу передачи данных GigEVision.

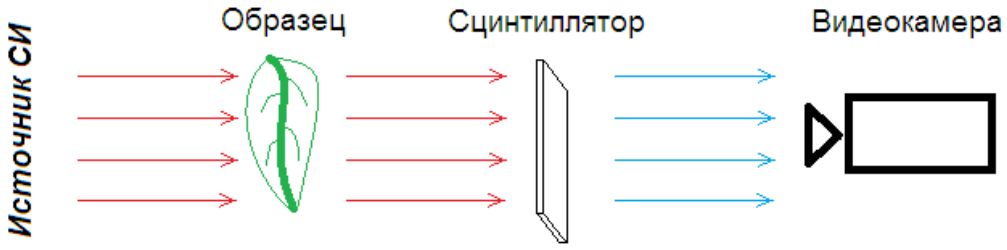


Рис. 1. Применение высокоскоростной видеокамеры для работы с СИ.

Применимость высокоскоростной видеокамеры объясняется значительным размером пикселя и, как следствие, высокой чувствительностью, что позволит иметь меньшую толщину сцинтилляционной пленки люминофора и положительно скажется на разрешающей способности экспериментальной установки. Благодаря съемному сенсору возможна быстрая замена сенсора при появлении битых пикселей вследствие воздействия СИ.

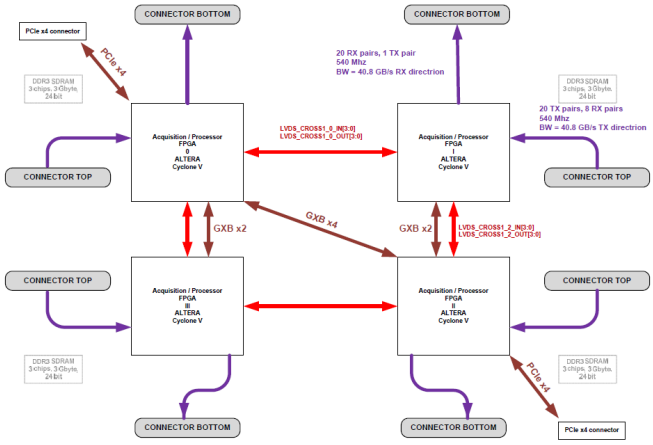


Рис.2. Блок-схема базовой платы высокоскоростной видеокамеры.

На рис.2. приведена блок-схема базовой платы высокоскоростной видеокамеры, отвечающей за сохранение и передачу данных. Конструктивно устройство имеет гибкую параллельную архитектуру, способную обрабатывать значительный поток данных. Прибор

обладает повышенной выживаемостью при работе с ионизирующим излучением вследствие модульной архитектуры.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований № 2.3.1.2.4.

Литература:

[1] P43 for manufacturing of large area scintillating screens / V. Balakin, O. Meshkov, V. Ulianitsky [et al.]. – Текст : электронный // Journal of Instrumentation. – 2022. – Vol. 17. – № 8. – P. P08020. – URL: https://doi.org/10.1088/1748-0221/17/08/P08020

СД-I-18

Разработка сверхпроводящих спиральных ондуляторов

Седов А.А.[1], Мезенцев Н.А.[1], Ракшун Я.В.[1,2], Сафронов А.Н.[1], Хомяков Ю.В.[1,3], Чернов В.А.[1], Шкаруба В.А.[1]

1 – ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – ИГМ им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

3 – ЦКП "СКИФ", Кольцово, Россия

A.A.Sedov@inp.nsk.su

Современные источники синхротронного излучения с энергией 3 ГэВ и менее позволяют генерировать излучение с высокой плотностью потока фотонов в спектрально узких линиях в энергетическом диапазоне ≤ 2 кэВ, что представляет интерес для таких задач, как микроскопия в «окне прозрачности воды», экстремальная ультрафиолетовая литография (EUV-литография), микроскопия биологических образцов в диапазоне «tender x-ray» и других.

Одной из серьёзных проблем, возникающих при работе рентгеновской оптики с интенсивными пучками излучения, является тепломеханическая стабильность. Существует решение, которое позволяет пространственно разделить гармоники излучения, – генерация излучения с круговой поляризацией. В этом случае фундаментальной гармоника излучения ондулятора распространяется вдоль его оси, а все остальные гармоники излучения – в конусе вокруг этой оси, что позволяет значительно снизить тепловую нагрузку на оптику. Также это снижает требования для величины фазовой ошибки, которая определяется геометрической точностью изготовления вставного устройства, так как большая фазовая ошибка снижает интенсивность излучения более высоких гармоник.

В настоящий момент ведутся работы по разработке спиральных сверхпроводящих ондуляторов для станции "Наноскопия в мягком диапазоне", установка которой планируется на синхротроне четвертого поколения СКИФ, а также для модернизированного источника синхротронного излучения ТНК в Зеленограде.

Была предложена конструкция спирального сверхпроводящего ондулятора с периодом 50 мм, межполюсным зазором 26 мм и амплитудой магнитного поля на оси 0,4 Тл для ТНК. Данное вставное устройство состоит из обмотки в форме двойной спирали с противоположными направлениями токов, которая лежит в пазах, вырезанных в цилиндрическом корпусе, причем одна спираль смещена относительно другой на полпериода вдоль оси ондулятора [1].

Все расчеты для оптимизации выполнялись с помощью программы Mathcad. Оптимальные число витков и слоев (2 и 22 соответственно) было выбрано по параметрам критической поверхности используемого сверхпроводника. Характеристики спектров излучения, генерируемых оптимизированными устройствами, были рассчитаны с использованием кода SPECTRA [2]. На рисунке 1 представлена огибающая спектральной плотности потока фотонов 1 гармоники ондулятора для ТНК.

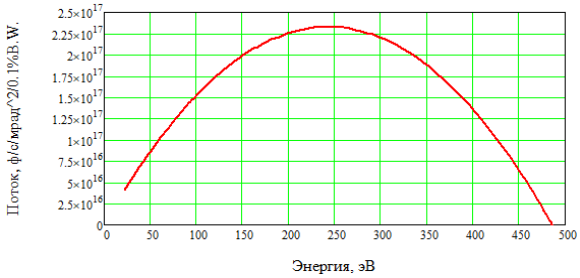


Рис. 1. Огибающая спектральной плотности потока фотонов 1 гармоники ондулятора

Также на основе модели спирального ондулятора была предложена и рассчитана модель двухпериодного сверхпроводящего ондулятора для СКИФ. Устройство состоит из пары соосных сверхпроводящих спиральных ондуляторов с периодами λ_u = 44 мм (внутренняя обмотка) и λ_u = 70 мм (внешняя обмотка), запитываемых независимо. Каждое вставное устройство представляет собой каркас из алюминиевого сплава с высокой теплопроводностью при низких температурах и обмоток выполненных в форме двойной спирали с противоположными направлениями токов, причем одна спираль смещена относительно другой на половину магнитного периода вдоль оси ондулятора. Для расчетов магнитного поля был выбран коммерчески доступный на сегодняшний день сверхпроводящий провод из NbTi диаметром 0.92 мм. Данный провод способен выдерживать токи до 550 А в магнитном поле 7 Тл и температуре 4,2 К.

Изменение тока обмоток позволяет перестраивать энергию фундаментальной гармоники ондуляторного излучения в широком спектральном диапазоне от ЭУФ до «tender X-rays»: для внутренней обмотки от 300 эВ до 1.9 кэВ, для внешней – от 51 эВ до 1.2 кэВ. На рисунке 2 показана огибающая спектральной плотности потока фотонов 1 гармоники ондулятора для обоих периодов.

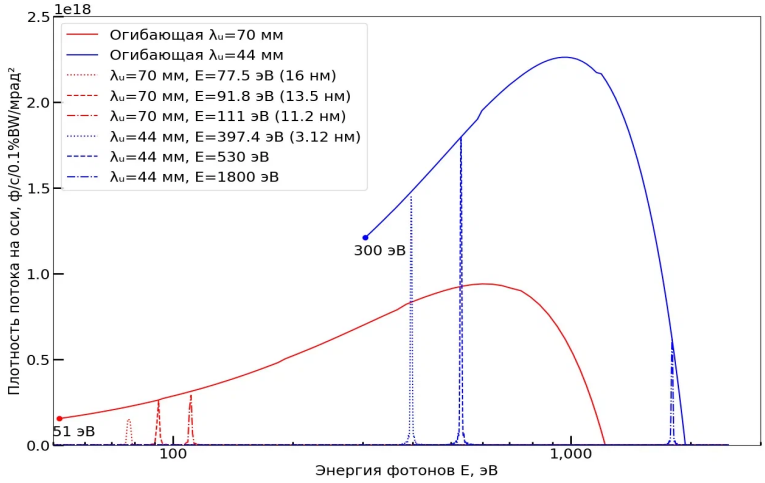


Рис. 2 Спектральный поток фотонов сверхпроводящего спирального ондулятора для основных режимов работы станции и их огибающая

Литература:

[1] M. Kasa, M. Borland, L. Emery, J. Fuerst, K.C. Harkay et al. Development and operating experience of a 1.2-m long helical superconducting undulator at the Argonne Advanced Photon Source. Phys.Rev.Accel.Beams 23 (2020) 5

[2] T. Tanaka, H. Kitamura. SPECTRA : a synchrotron radiation research papers // J. Synchrotron Radiat. 2001. Vol. 8, № 6. P. 1221–1228.

СД-I-19

Разработка двухкристального монохроматора с сагиттальной фокусировкой для станции 1-5 ЦКП «СКИФ»

Скоков Д.В.[1], Макаров С.Н.[1], Довженко Г.Д.[2], Купер К.Э.[2]
1 – Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа имени Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
15823@mail.ru

Ключевой методикой реализуемой на станции 1-5 ЦКП «СКИФ» «Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне» является дифракция рентгеновского излучения, в том числе in situ. Для изучения конструкционных материалов и геологических образцов на станции 1-5 предполагается использование высоких энергий фотонов и сфокусированных пучков. Одним из возможных технологических решений для формирования таких пучков является двухкристальный монохроматор в геометрии Лауэ с сагиттальной фокусировкой (ДКЛС) [1].

Для эффективного решения научных задач станции 1-5, монохроматор должен работать с диапазоном энергий фотонов 30-150 кэВ. Высокоэнергетическое излучение и необходимость в точном контроле радиуса изгиба кристаллов предъявляют серьёзные требования к системе позиционирования монохроматора. Поскольку в качестве источника высокоэнергетических фотонов на кольце ЦКП «СКИФ» применяется вигглер, имеющий высокую мощность пучка СИ, также остро стоит проблема отвода поглощённого тепла с первого кристалла ДКЛС.

1 Общее описание

Сагиттальный монохроматор состоит из двух кристаллов монокристаллического кремния с ориентацией плоской поверхности (100), имеющих толщины по 0.5 мм.

Первый кристалл (1) – охлаждаемый, второй кристалл (2) – неохлаждаемый.

Монохроматор преобразует падающий на первый кристалл (1) входной полихроматический («белый») пучок СИ (4), в выходной монохроматический пучок (5), смещенный на 25 мм по отношению к оси входного пучка (4). Сагиттальный изгиб каждого из кристаллов осуществляется при помощи индивидуального механического интерфейса (3), вокруг оси, лежащей в плоскости поверхности кристалла и вертикальной плоскости.

Положение и каждого из кристаллов задается Гексаподами (6), с целью юстировки оптической схемы при перестройке энергии выходного пучка и сохранения направления выходного пучка (5).

2 Результаты теплового моделирования для входного пучка СИ с полной апертурой

При моделировании тепловой нагрузки на первый кристалл монохроматора при полной апертуре пучка СИ 2 x 0.2 мрад дает следующие ключевые параметры: полная мощность падающего пучка СИ – 3.8 кВт; поглощаемая и кристаллом тепловая мощность – 0.3 кВт; пиковая температура кристалла – 450 °C; пиковое напряжение в материале кристалла (по критерию фон Мизеса) – 150 МПа.

Данный режим является предельным по теплонагруженности первого кристалла сагиттального монохроматора станции 1-5 и не рекомендован к применению.

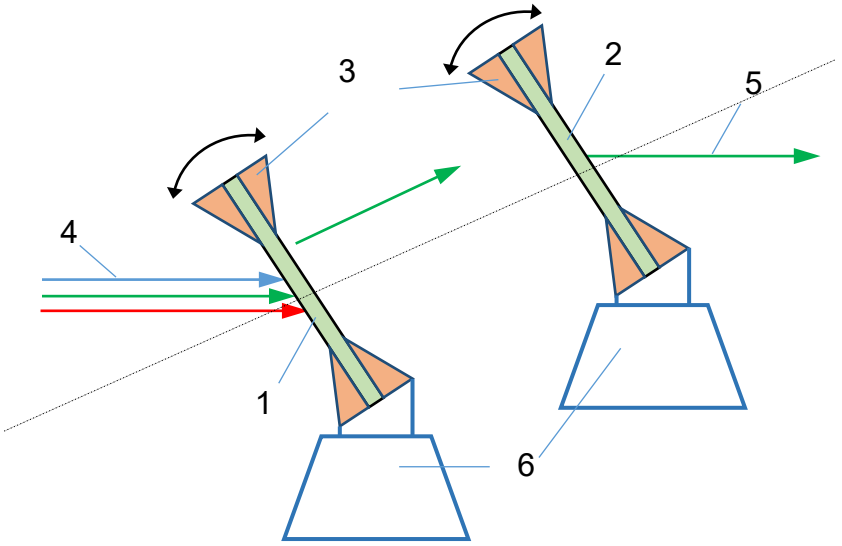
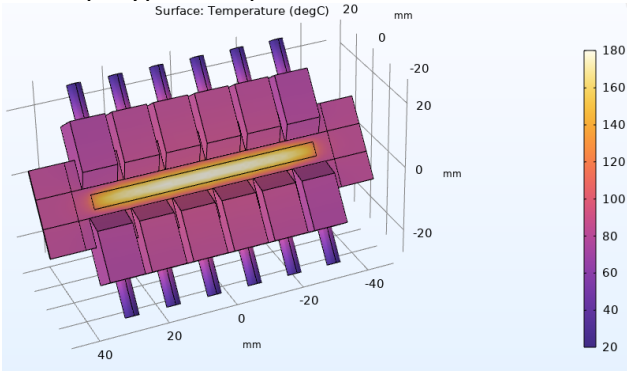


Рисунок 1 – принципиальное устройство сагиттального монохроматора.

Рекомендуется использование ограничения вертикальной апертуры пучка СИ (0.1 мрад, 50% от максимальной), при этом получены следующие параметры теплового нагружения первого кристалла, значительно более безопасное для эксплуатации: поглощаемая и кристаллом тепловая мощность – 0.17 кВт; – пиковая температура кристалла –182 °C; пиковое напряжение в материале кристалла (по критерию фон Мизеса) – 40 МПа. Карта температур и механического напряжения в кристалле для ограниченного по апертуре пучка СИ представлена на рис. 2

Температура поверхности, °C



Объемные напряжения в кристалле, МПа

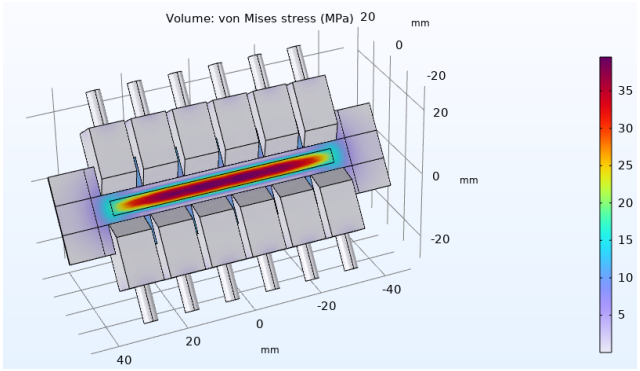


Рисунок 2 – Результаты моделирования теплового нагружения первого кристалла сагиттального монохроматора пучком СИ ст. 1-5 с ограниченной вертикальной апертурой (0.1 мрад, 50% от максимальной)

3 Заключение

Предлагаемое техническое решение для сагиттального монохроматора, позволяет применять кремниевые кристаллы, имеющие простую форму поверхности. Рекомендовано применение ограничения пучка СИ, 50% по вертикальной апертуре пучка (2 x 0.1 мрад) с целью снизить риски повреждения первого кристалла монохроматора СКИФ 1-5.

Литература:

[1] 1. Zhong Z. [и др.]. Sagittal focusing of high-energy synchrotron X-rays with asymmetric Laue crystals. I. Theoretical considerations // Journal of Applied Crystallography. 2001. № 4 (34). С. 504–509.

СД-I-20

Разработка быстрого затвора пучка для станции 1-3 «Быстропротекающие процессы» ЦКП «СКИФ»

Студенников А.А., Пальчиков Е.И., Прууэл Э.Р., Станкевич С.В.
Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия
aleksei.studennikov@mail.ru

За последнее время доля исследований взрывных и ударно-волновых процессов с применением синхротронного излучение стремительно возрастает. Такая тенденция складывается благодаря стремительному росту источников синхротронного излучения и развитию быстрых методик регистрации процессов. Поскольку эксперимент связанный с ударно-волновым или взрывным нагружением требует специфического оборудования и персонала такие центры обычно сконцентрированы в местах существующей научной школы в данном направлении. Так в Новосибирском академическом сообществе было инициировано строительство Сибирского Кольцевого Источника Фотонов (ЦКП «СКИФ») и экспериментальной станции 1-3 «Быстропротекающие процессы» в числе первоочередных.

Ввиду сложности и ограничений проведения подобных экспериментов требования к надежности и точности оборудования предъявляются на высоком уровне. Любой быстрый рентгенографический эксперимент подобного рода можно разделить на отдельные этапы: а) транспорт синхротронного излучения и его оптическое преобразование; б) запуск самого процесса; в) регистрация процесса. Каждый этап operando эксперимента осложняется требованием к временному разрешению и высокой плотности мощности выводимого излучения. Во всех этапах эксперимента самым уязвимым является детекторное оборудования системы регистрации и именно ее требования диктуют рамки синхронизации процесса, а значит все элементы оборудования в эксперименте должны быть синхронизированными с точностью не хуже 100 мкс и срабатывать последовательно.

Одной из наиболее сложных из методик с точки зрения синхронизации является ударно-волновая регистрация процессов, нагружаемых ПУВД (Пневматическое устройство высокого давления). Ее сложность заключается в том, что остальные методики реализуемые в рамках работы станции 1-3 ЦКП «СКИФ» предполагают привязываться к фазе ускорительного кольца и цепи задержек запуска от него. Однако само разгонное устройство срабатывает от разрыва мембраны в камере высокого давления и добавляет еще одну неопределенную величину в эксперимент. Следовательно, именно работа ПУВД, должно инициировать запуск эксперимента, а привычная система стробирования пучка [1] не позволит раскрыть вовремя излучения. Исходя из приведенных требований существует необходимость разработки быстрого затвора пучка с временем срабатывания менее 100 мкс.

Очевидно, что такие специфические элементы синхротронных экспериментальных станций являются редкими, если не уникальными и практических наработок подобного оборудования в мире крайне мало. Однако из требований к работе понятно, что реализовать такое устройство на классических принципах рентгеновских затворов не получиться, нужна бОльшная энергетика и нестандартные решения. Одним из таковых может быть принцип электромагнитного импульсного метания активной части затвора (заслонки) с ускорениями порядка 10^6 g и скоростями порядка 100 м/с. Так, например, в работах [2,3,4] с помощью магнитного поля удавалось разогнать кольцевые проводники до гиперзвуковых скоростей свыше 3 км/с. Однако такие скорости были достигнуты на рельсотроне, чьи габариты и характеристики, по ряду причин, не подходят для реализации на экспериментальных станциях ЦКП «СКИФ». Кроме того, в случае затвора важна даже не конечная скорость, а время открывания канала пучка, отсчитанное от команды пуска устройства – то есть дистанция перемещения за минимальное, но точно контролируемое время. Для генерации ускорения

метаемого лайнера больше подходит концепция, описанная в работах [5,6] где для генерации ударной волны в жидкости, использовалась электромагнитная ячейка из спиральной катушки, подключаемой к батарее конденсаторов, которая толкала магнитным полем проводящую мембрану. Разработка нового затвора облегчается использованием наработок в системах генерации ударных волн [5,6] и сильноточных систем импульсных рентгеновских аппаратов [7].

Концепция затвора (рис. 1-а) Представляет собой заслонку (метаемый лайнер) затвора выполненную в виде медного кольца квадратного сечения 3×3 мм внешним диаметром 40 мм. Заслонка ускоряется импульсным магнитным полем, которое создаётся круглой катушкой, состоящей из 10 витков ленточного проводника шириной 10 мм. Катушка залита в плиту из неориентированного стеклотекстолита – для поглощения импульса отдачи. На катушку через управляемый разрядник РУ-86 разряжается малоиндуктивная сборка конденсаторов (4 шт. К75-48 1 мкФ 10 кВ) – батарея с ёмкостью 1 мкФ 20 кВ и суммарной энергией разряда 200 Дж. Батарея сделана симметричной ± 10 кВ относительно земляного потенциала – для снижения эффекта короны на проводниках и для уменьшения электромагнитных помех внешним устройствам при разряде. Система запуска разрядника содержит внутренний блок задержек от 2 до 9999 мкс, для работы с разными видами экспериментов и процессов.

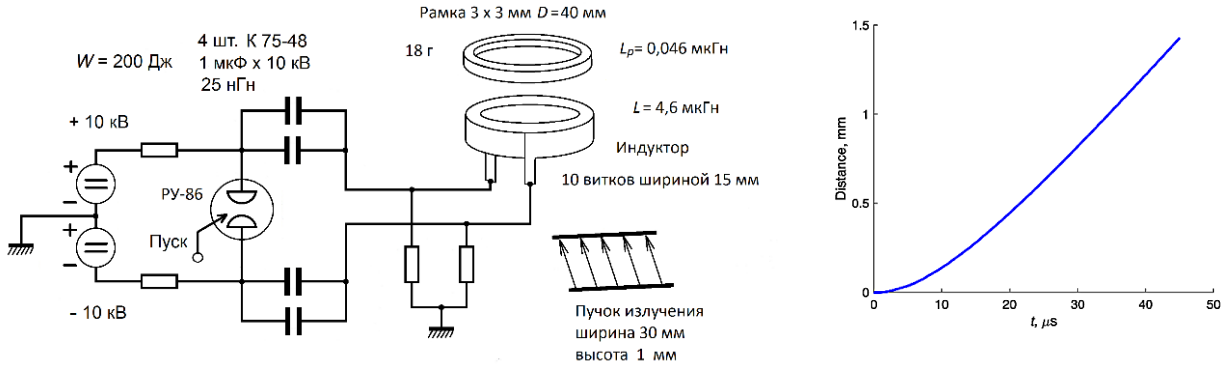


Рис. 1. а) Принципиальная схема затвора; б) Динамика разгона затвора

В результате применения такой компоновки быстрого затвора численный расчет в системе COMSOL (рис. 1-б) показывает, что в первые 50 мкс затвор преодолевает 1,5 мм, чего уже достаточно для раскрытия полной вертикальной апертуры пучка синхротронного излучения станции 1-3 ЦКП «СКИФ». При этом ускорение рамки затвора составляет

$$a = \frac{2S}{t^2} = \frac{2 \cdot 1{,}5 \cdot 10^{-3}}{(50 \cdot 10^{-6})^2} = 1{,}2 \cdot 10^6\ g$$

Благодарности: Работа выполнена за счет средств федерального бюджета в лице Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2025-459.

Литература:

[1] И. А. Рубцов , Ya. V. Zubavichus , К. А. Тен , É. R. Pruuél , A. O. Kashkarov , К. Э. Купер , А.А. Студенников , B.P. Tolochko , L. Shekhtman Conceptual Design of a Synchrotron Beamline Dedicated to Ultrafast Time-Resolved Small-Angle X-Ray Scattering/ Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2023. V.87. N5. P.600-603. DOI: 10.3103/s1062873822701751.
[2] В.Н. Бондалетов и др. Бесконтактное индуктивное ускорение проводников до гиперзвуковых скоростей. – ПМТФ, 1975, №5.
[3] В.Н. Бондолетов. Индуктивное ускорение проводников. – ЖТФ, 1967, т. 37, вып. 2.
[4] А.М. Балтаханов, В.Н. Бондалетов. Ускорение проводников в магнитном поле. –Изв. АН СССР. Энергетика и транспорт, 1980, №3.
[5] А. С. Бесов, В. К. Кедринский, Е. И. Пальчиков, Изучение начальной стадии кавитации с помощью дифракционной оптической методики, Письма в ЖТФ, 1984, том 10, выпуск 4, 240–244. https://www.mathnet.ru/links/7367fe9db81f888bcef5c00792b7c83c/pjtf1157.pdf
[6] А.С. Бесов, В.К. Кедринский, Е.И Пальчиков. О пороговых кавитационных эффектах в импульсных волнах разрежения. Письма в ЖТФ.- 1989. Т. 15.-Вып.16.- с. 23- 26. https://www.mathnet.ru/links/d9dd4026f029b56d03c98ed05c178565/pjtf2827.pdf
[7] Пальчиков Е.И. Портативные импульсные рентгеновские установки для регистрации быстропротекающих процессов. Часть III. Обзор устройств разработки ИГиЛ СО РАН // Южно-Сибирский научный вестник. – 2018. – № 4. – с. 275-286. http://s-sibsb.ru/images/articles/2018/4/S-SibSB_Issue_24-275-286.pdf

СД-I-21

Моделирование и оптимизация монохроматора с плоскими дифракционными решетками для мягкого рентгеновского диапазона

Сурикова Е.Е., Чумаков Р.Г.
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
sur-nrcki@yandex.ru

Монохроматоры с дифракционными решетками являются ключевыми компонентами каналов синхротронного излучения, обеспечивая селекцию энергии фотонов с высокой спектральной разрешающей способностью в диапазоне вакуумного ультрафиолета и мягкого рентгеновского излучения. В работе рассматривается монохроматор с плоскими дифракционными решетками для диапазона энергий 5–1000 эВ.

На основе аналитических зависимостей для дифракционных решеток и зеркал [1,2] разработана математическая модель, включающая автоматизированный расчет углов падения и дифракции в зависимости от энергии. Данный подход был реализован в пользовательском коде для программы XRT [3], что позволило проводить моделирование с учетом перестройки геометрии монохроматора. Такая модификация открывает возможность оптимизации всей линии вывода излучения — от выбора параметров зеркал до расположения выходных щелей. В результате были получены спектральные характеристики, представленные на рисунке 1.

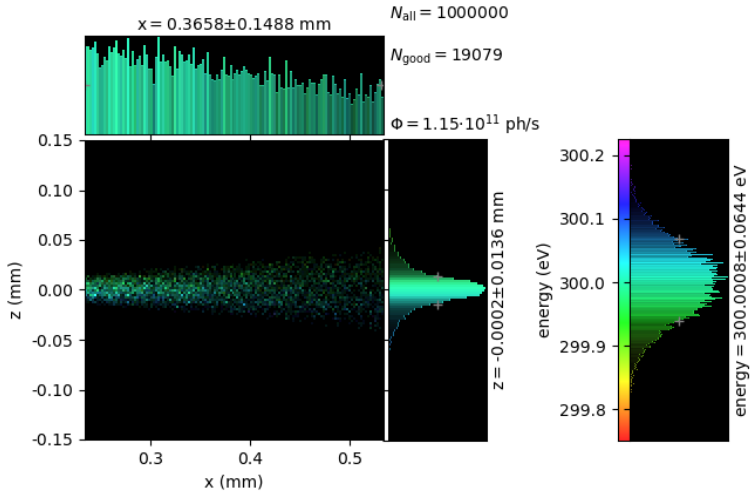


Рис. 1. Спектральные характеристики излучения после прохождения выходной щели

Результаты моделирования включают расчет спектральных характеристик и оценку разрешающей способности при различных конфигурациях. Полученные данные будут использованы при проектировании и конструировании монохроматора для канала вывода излучения на КИСИ-Курчатов, на ТНК Зеленоград и в рамках проекта «СИЛА».

Литература:

[1] Petersen H. The plane grating and elliptical mirror: a new optical configuration for monochromators //Optics Communications. 1982. Т. 40. №. 6. P. 402-406.
[2] Sjoblom P., Todorescua G. and Urpelainen S. Understanding the mechanical limitations of the performance of soft X-ray monochromators at MAX IV laboratory // Synchrotron Rad.. 2020. №27. P. 272-283.
[3] Klementiev K., Chernikov R. Powerful scriptable ray tracing package xrt //Advances in computational methods for X-ray optics III. SPIE, 2014. Т. 9209. С. 60-75.

СД-I-22

Дискретные рентгеновские трансфокаторы станции 1-2 «Структурная диагностика»

Бескончин К.В.[1], Денисов В.В.[1], Винокуров З.С.[2], Сыртанов М.С.[1], Ковальский С.С.[1], Дульцев К.И.[1], Назаров А.С.[1], Шмаков А.Н.[2]

1 – Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия

2 – Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук" (ЦКП "СКИФ"), Новосибирск, Россия

maxim-syrtanov@mail.ru

На сегодняшний день разработка прецизионного рентгенооптического оборудования для станций современных отечественных источников синхротронного излучения (СИ) является актуальной ввиду активного строительства и развития таких проектов, как «СКИФ», «СИЛА», «РИФ». Одними из важнейших приборов ступенчатого/плавного изменения фокусного расстояния оптической системы (от нескольких см до сотен м), а также гибкого управления параметрами пучка СИ являются рентгеновские трансфокаторы на основе составных преломляющих линз [1, 2].

В настоящей работе представлены охлаждаемый и неохлаждаемый дискретные рентгеновские трансфокаторы, разработанные в Институте сильноточной электроники СО РАН на станцию 1-2 «Структурная диагностика» ЦКП «СКИФ». Рефракционные линзы изготовлены сотрудниками Балтийского федерального университета им. Канта. Охлаждаемый трансфокатор расположен в оптическом хатче станции между блоком охлаждаемых щелей и двухкристальным монохроматором и предназначен для коллимации пучка СИ. Неохлаждаемый трансфокатор находится в экспериментальном хатче после монохроматора и предназначен для фокусировки пучка СИ на исследуемом образце. Трансфокаторы обеспечивают ввод линз дискретно (картриджами): неохлаждаемый – 0-63 шт.; охлаждаемый – 0-23 шт. Бериллиевые линзы, апертура которых составляет 1,4 мм при общем диаметре корпуса линзы 15 мм, располагаются в 6 картриджах со следующим их количеством в каждом: в неохлаждаемом – 1 шт., 2 шт., 4 шт., 8 шт., 16 шт., 32 шт.; в охлаждаемом – 1 шт., 2 шт., 4 шт., 8 шт., 8 шт. Трансфокаторы обеспечивают работу в энергетическом диапазоне 6-27 кэВ. Размер фокусного пятна на образце варьируется в диапазоне от 1×1 мм^2 до 10×10 мкм^2. Вакуумный объем, в котором располагаются линзы, будет оснащен автоматизированной системой позиционирования относительно оси пучка СИ вертикального/горизонтального в диапазоне ±25 мм с точностью ±5 мкм и угловых **Ф**Z, **Ф**X в диапазоне ±1° с точностью ±5 мкрад. Перемещением по оси **Ф**Y (для неохлаждаемого трансфокатора) в диапазоне ±500 мм с точностью ±30 мкм. Вакуумные объемы трансфокаторов обеспечивают глубину вакуума не хуже 1x10^{-7} мбар. Составные преломляющие линзы обладают следующими характеристиками: шероховатость оптической поверхности Ra от 0,01 мкм до 1,0 мкм; массовая доля Be от 99,0 % до 99,9 %; форма рабочей части - двояковогнутый параболоид вращения с радиусом кривизны 500 мкм; точность позиционирования линз –

среднеквадратичное отклонение от оси не более 5 мкм. Охлаждаемый трансфокатор оснащен водяной системой охлаждения, способной рассеять тепловую мощность до 100 Вт.

Литература:

[1] Vaughan G., Wright J., Bytchkov A. et al. // Journal of Synchrotron Radiation. 2011. V. 18 (2). P. 125-133.
[2] Нарикович А.С., Лятун И.И., Зверев Д.А. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. № 11. С. 90-100.

СД-I-23

Дифрактометр высокого разрешения станции 1-2 «Структурная диагностика»

Бескончин К.В.[1], Денисов В.В.[1], Винокуров З.С.[2], Сыртанов М.С.[1], Ковальский С.С.[1], Тересов А.Д.[1], Гоголев А.С.[3], Ерунцов В.В.[3], Дульцев К.И.[1], Шмаков А.Н.[2], Андреев М.В.[1]

1 – Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия

2 – Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук" (ЦКП "СКИФ"), Новосибирск, Россия

3 – Томский политехнический университет, Томск, Россия

maxim-syrtanov@mail.ru

Критически важной задачей современного материаловедения в области разработки новых функциональных материалов является анализ изменения структурно-фазового состояния непосредственно в условиях близких к эксплуатационным, включая повышенные температуры и агрессивные среды [1]. Подавляющее большинство указанных экспериментов проводится на источниках синхротронного излучения с помощью специализированных дифрактометров [2]. Причем во многих случаях необходимо высокое разрешение для точного определения параметров кристаллической структуры или разделения перекрывающихся рефлексов в исследуемом материале.

В настоящей работе представлен дифрактометр высокого разрешения (ДВР), создаваемый в Институте сильноточной электроники СО РАН для станции 1-2 «Структурная диагностика» ЦКП «СКИФ». Разработанный прибор оснащен двухкружным $\theta/2\theta$ гониометром, на котором установлен $\alpha/2\alpha$ гониометр для системы детектирования на базе 9 кристаллов-мультианализаторов. Детекторная система ДВР представляет собой 9-ти канальную систему регистрации фотонов в диапазоне энергий 6-27 кэВ с квантовой эффективностью более 60%, быстродействием > 10^4 сч/с. Детектор спроектирован и изготовлен сотрудниками Томского политехнического университета. Основные характеристики гониометров представлены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1 – Параметры гониометра $\theta/2\theta$

Гониометр θ	**внутренний**
Диапазон перемещений	±180°
Разрешение	≤ 0,001°
Нагрузка на плечо 250 мм	≥ 35 кг
Гониометр 2θ	**внутренний**
Диапазон перемещений	-5 – +180°
Разрешение	≤ 0,001°
Нагрузка на плечо 250 мм	≥ 50 кг

Таблица 2 – Параметры гониометра $\alpha/2\alpha$

Гониометр α	**внутренний**
Диапазон перемещений	±45°

Разрешение	≤ 0,0003°
Расстояние между гониометрами $\alpha/2\alpha$ и $\theta/2\theta$	425 мм
Гониометр 2α	**внутренний**
Диапазон перемещений	±45°
Разрешение	≤ 0,001°
Расстояние между гониометром $\alpha/2\alpha$ и детекторами	370 мм

Теоретический расчет показал, что на энергии 17,5 кэВ в области кварцевого триплета (SRM 1878a, 2θ~30°) инструментальный вклад в ширину дифракционной линии составит ~ 0,0026°.

Литература:

[1] Anis, S.F., Hashaikeh, R., Hilal, N. // Desalination. 2019. V. 468. №. 114077.
[2] Syrtanov M., Garanin G., Kashkarov E. et al. // Metals. 2020. V. 10 (4). №. 447.

СД-I-24

Расчёты ключевых параметров генерирующей структуры и канала вывода ИК-излучения для станции «ИК-диагностика» синхротронного источника «СКИФ»

Ташкеев Н.А.[1,2,3]

1 – Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

3 – Центр коллективного пользования ЦКП «СКИФ», Новосибирск, Россия

n.a.tashkeev@srf-skif.ru

Актуальность исследования. Станция «ИК-диагностика» синхротронного источника «СКИФ» создаётся как уникальный комплекс для исследований в инфракрасном и терагерцовом диапазонах. В сравнении с традиционными лабораторными ИК-источниками синхротронное излучение обеспечивает на порядки более высокую плотность потока, что критично для ИК-микроскопии с разрешением на дифракционном пределе. Изза значительной угловой расходимостью ИК-излучения, формируемого поворотными магнитами, конструкция вакуумной камеры и габариты первого зеркала должны обеспечивать эффективный сбор и вывод пучка к экспериментальным установкам [1].

Цель и задачи. Цель работы — провести расчёты и теоретическое проектирование системы генерации, сбора и транспортировки синхротронного ИК-излучения для станции «ИК-диагностика» ЦКП «СКИФ». С учетом полученных результатов будет реализована инфраструктура станции. Основные задачи:

1) оптимизация геометрии оптических элементов: определение размеров первого зеркала и фокальной области для максимизации собираемой мощности;

2) анализ тепловой нагрузки на первое зеркало: оценка поглощённой мощности и температурных распределений;

3) проектирование оптического канала транспортировки: трассировка луча с учётом расположения хатча и подбор формы/положения зеркал [2].

Методы. Численное моделирование на основе пакета Synchrotron Radiation Workshop (SRW) применяется для расчёта характеристик синхротронного излучения, оценки угловой расходимости, оптимизации параметров генерирующей структуры и оптических элементов канала [3].

Ожидаемые результаты. Будут определены параметры генерирующей структуры и оптики (включая размеры первого зеркала и положение фокальной области) для эффективного сбора излучения поворотного магнита. Представлены оценки тепловой нагрузки на первом зеркале. Предложена теоретически обоснованная оптическая схема транспортировки ИК-излучения с минимальными потерями и аберрациями до хатча.

Практическая значимость. Оптимизация вакуумной камеры и оптического канала обеспечит высокую яркость ИК-пучка и достижение целевых параметров станции «ИК-диагностика», что позволит проводить передовые исследования в ИК-микроскопии/наноскопии и магнитодипольной спектроскопии. Результаты важны для

исследований наноструктур, мономолекулярных магнитов, биомедицинских материалов и других объектов исследования фундаментальной и прикладной науки.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, Соглашение № 075-15-2025-459**.**

Литература:

[1] Jaeschke E., Khan S., Schneider J., Hastings J. (eds). Synchrotron Light Sources and Free-Electron Lasers. Cham: Springer International Publishing, 2020. 1399 p. ISBN 978-3-030-23201-6. DOI: 10.1007/978-3-030-23201-6.
[2] Santos T.M., Lordano S., Mayer R.A., Volpe L., Rodrigues G.M., Mayer B., Westfahl H. Jr., Freitas R.O. Synchrotron infrared nanospectroscopy in fourth-generation storage rings. Journal of Synchrotron Radiation, 2022, Vol. 29, No. 3, pp. 560–572. DOI: 10.1107/S1600577521007037.
[3] SRW — Synchrotron Radiation Workshop, GitHub repository. https://github.com/ochubar/SRW

СД-I-25

Нейросетевая модель регулируемой маски фронтенда ЦКП «СКИФ» как основа его цифрового двойника

Марченко М.А.[1], Шакиров Д.С.[2], Шакиров С.Р.[1]

1 – Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

d.shakirov@g.nsu.ru

К настоящему моменту сложилась мировая практика использования цифровых двойников при эксплуатации крупных научных установок, к которым относится центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» (ЦКП «СКИФ») [1-4]. Цифровой двойник (ЦД) изделия — это система, состоящая из его цифровой модели и двусторонних информационных связей с самим изделием (при его наличии) [5].

Регулируемая маска является составной частью фронтенда, формирователя пучка синхротронного излучения, и предназначена для коллимации пучка и придания ему необходимой для эксперимента апертуры. ЦД регулируемой маски будет являться частью комплексного цифрового двойника всего ЦКП «СКИФ», работы по созданию которого ведутся в ИВМиМГ СО РАН.

ЦД позволит значительно снизить стоимость обслуживания ЦКП «СКИФ» за счёт предиктивного анализа состояния оборудования, а также даст возможность проводить обучение персонала без риска нанести вред физическому изделию (использование ЦД в качестве тренажера). С помощью ЦД можно будет ставить виртуальные эксперименты и определять, что будет с установкой в различных, в том числе, нештатных и аварийных ситуациях.

Целью данной работы является создание прототипа цифрового двойника регулируемой маски фронтенда ЦКП «СКИФ».

Для достижения указанной цели были решены следующие задачи: проанализирована работа регулируемой маски; разработана структура модели регулируемой маски; промоделирована в специализированном программном пакете работа регулируемой маски в различных режимах; наработаны синтетические данные, на которых была обучена нейросеть; построен на основе нейросетевых моделей прототип цифрового двойника регулируемой маски.

Наиболее ресурсоемкой задачей является расчет распределения температурных полей в шторках устройства регулировки коллимации пучка (составная часть регулируемой маски), формирующихся вследствие взаимодействия с пучком синхротронного излучения. На рисунке 1 показан пример такого распределения.

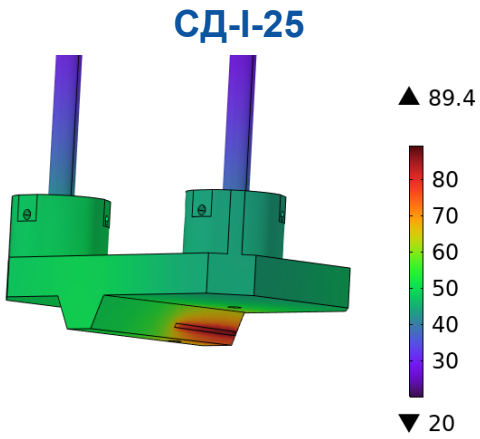


Рисунок 1. Поле распределения температур в шторке регулируемой маски.

Применение нейросетей необходимо для расчетов температур элементов регулируемой маски в тех режимах работы, в которых не проводились предварительные расчёты в специализированных программных пакетах, а также с целью ускорения этих расчётов и получения возможности воспроизведения виртуальных экспериментов в режиме реального времени. На данном этапе ЦКП «СКИФ» ещё не введен в эксплуатацию и поэтому обучение нейросетевых моделей возможно исключительно на синтетических (расчетных) данных.

В результате данной работы создан прототип цифрового двойника регулируемой маски фронтенда ЦКП «СКИФ», построенный на основе нейросетевых моделей её составных частей.

Благодарности: Исследования выполнены в рамках государственного задания ИВМиМГ СО РАН FWNM-2025-0005.

Литература:

[1] Bednarz, T., et al.: Digital Twin of the Australian Square Kilometre Array (ASKAP). In: SIGGRAPH Asia 2020 Posters. Article 15. ACM (2020). [URL: https://doi.org/10.1145/3415264.3425462 дата обращения: 12.04.2025]
[2] Kosyakov D.V., Marchenko M.A. Digital Twins in Large-Scale Scientific Infrastructure Projects // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2023. Vol. 10, № 3. P. 88-106. DOI: 10.14529/jsfi230308
[3] Li, Q. W., et al.: Prognostics and Health Management of FAST Cable-Net Structure Based on Digital Twin Technology. Res. Astron. Astrophys. 20(5) 2020. [URL: https://doi.org/10.1088/1674-4527/20/5/67 дата обращения: 05.05.2025]
[4] Zhang, Q., Wu, P., Zhao, Z.: Design and Application of Digital Twin System Architecture for Large Radio Telescope. Jisuanji Jicheng Zhizao Xitong/Comput.
[5] ГОСТ Р 57700.37-2021 Компьютерные модели и моделирование. Цифровые двойники изделий. Общие положения, Москва, 2021, 10 с.

СД-II-01

Температурные эффекты в спектрах запрещенных отражений в водородосодержащих кристаллах

Акимова К.А.[1], Овчинникова Е.Н.[1], Орешко А.П.[1], Дмитриенко В.Е.[2]
1 – МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
2 – Отделение «Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия
AkimovaKA@my.msu.ru

В работе рассматривается возможность получения информации о поведении атомов водорода в семействе кристаллов MH_2PO_4 (M=K, Rb) путем исследования температурной зависимости запрещенных отражений при дифракции синхротронного излучения с энергией, близкой к К-краю поглощения атомов металла. В многочисленных работах, посвященных этому вопросу, показано, что именно поведение протонов является причиной фазового перехода из пара- в сегнетоэлектрическую фазу, а в параэлектрической фазе является весьма нетривиальным. Спектры запрещенных отражений, которые очень чувствительны к мгновенным атомным конфигурациям, могут дать дополнительную информацию о положениях протонов и характере их движений.

В работе проводится численное моделирование спектров отражений типа h00 (h=4n+2), запрещенных правилами погасаний в обеих фазах. Показано, что в результате перехода из пара- в сегнетоэлектрическую фазу снимается запрет на диполь-дипольное резонансное рассеяние, и это позволяет наблюдать фазовый переход как скачок интенсивности отражений. Предложена теоретическая модель, в которой резонансный атомный фактор калия или рубидия представлены в виде суммы диполь-квадрупольного и термоиндуцированного вкладов, а также предсказано существование третьего вклада, обусловленного изменением симметрии мгновенных конфигураций протонов на водородных связях с температурой [1]. Интерференция излучения, обусловленного тремя механизмами рассеяния, приводит к сложной зависимости спектров запрещенных отражений от температуры. Сопоставление расчетов на основе предложенной модели с экспериментальными данными, полученными на трех синхротронах третьего поколения [1,2], показало, что она адекватно описывает все наблюдаемые эффекты, а также позволяет получить информацию об изменении числа различных конфигураций, образованных атомами водорода, от температуры. Получены значения энергии активации полярных конфигураций и конфигураций типа Слейтера в параэлектрической фазе KDP от температуры.

Литература:

[1] C. Richter, D.V. Novikov, E.Kh. Mukhamedzhanov, et al.// Phys. Rev. 2014. B92. 214116.
[2] G. Beutier, S.P. Collins, G. Nisbet, et al. // Phys. Rev. 2015. V. B89, 094110.

СД-II-02

Исследование алюмооксидной керамики, содержащей гексаалюминат бария

Антропова К.А.
Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
antropova.2017@stud.nstu.ru

Повышение надежности керамических материалов на основе оксида алюминия за счет формирования в структуре соединений, называемых гексаалюминатами, продолжает активно рассматриваться различными исследовательскими коллективами. Отмечается, что положительное влияние на свойства алюмооксидной керамики оказывают небольшие количества гексаалюминатной фазы, которая формируется непосредственно в процессе спекания. При этом свойства керамических материалов в значительной степени зависят от структурных характеристик, что указывает на важность тщательного изучения последних [1,2]. В данной работе оценивается влияние режимов электроискрового спекания на структуру и свойства материалов системы Al_2O_3-BaO. Формирование гексаалюмината бария способствует как повышению уровня трещиностойкости Al_2O_3-керамики, так и стойкости к термическому удару, что потенциально ценно в области инструментальной промышленности [3].

Были получены порошковые смеси субмикронного порошка α-Al_2O_3 и BaO для формирования 15 масс. % гексаалюмината бария. В качестве образца сравнения подготовлен материал, не содержащий добавок. Диспергирование спиртовых суспензий проводили в шаровой мельнице в течение 8 часов. Спекание осуществляли методом электроискрового спекания (установка FUJI-SPS MS-1) в графитовой форме с использованием графитовой бумаги при температурах 1500, 1550 и 1600 °C при давлении прессования 17 МПа, время выдержки – 5 минут. После спекания графитовую бумагу удаляли механически, шлифы подготавливали по стандартной технологии. Фазовый состав спечённых материалов оценивали по дифракционным картинам, полученным с использованием источника синхротронного излучения ВЭПП-4 в «Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения». Съемка проведена в геометрии на просвет при длине волны 0,178 Å. Структуру исследовали на растровом электронном микроскопе Carl Zeiss EVO50XV.

Фазовый состав всех материалов представлен α-Al_2O_3 и $Ba_{0,83}Al_{11}O_{17,33}$ (рисунок 1). Не обнаружено рефлексов, соответствующих исходным компонентам или другим соединениям, что говорит о полном протекании реакции.

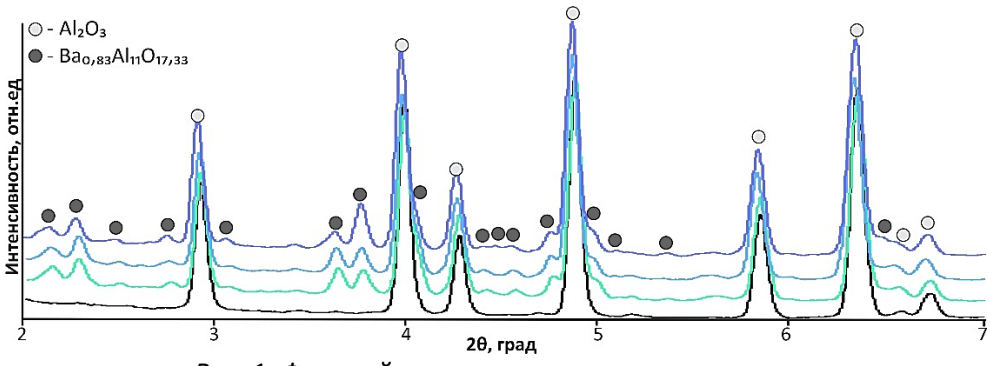


Рис. 1. Фазовый состав спеченных материалов

Структура материалов представлена зернами Al_2O_3, форма которых близка к равноосной, и зернами $Ba_{0,83}Al_{11}O_{17,33}$, форма которых близка к призматической (рисунок 2). Установлено, что наибольший средний размер зерен оксида алюминия наблюдается в материале без добавок и составляет 4,27±1,80 мкм. В материалах, содержащих гексаалюминат бария, средние размеры зерен Al_2O_3 составляют 1,49±0,80, 1,89±0,85 и 1,60±0,63 мкм при температурах 1500, 1550 и 1600 °C соответственно. С увеличением температуры спекания также наблюдается рост пластин $Ba_{0,83}Al_{11}O_{17,33}$, при этом соотношение длины и ширины остается близким к 1:4. В материалах, спеченных при 1500 °C, средняя длина и ширина пластин составляют 2,45±0,22 и 0,57±0,05 мкм. Эти параметры увеличиваются до 5,23±0,26 и 1,20±0,06 мкм соответственно после спекания при 1600 °C.

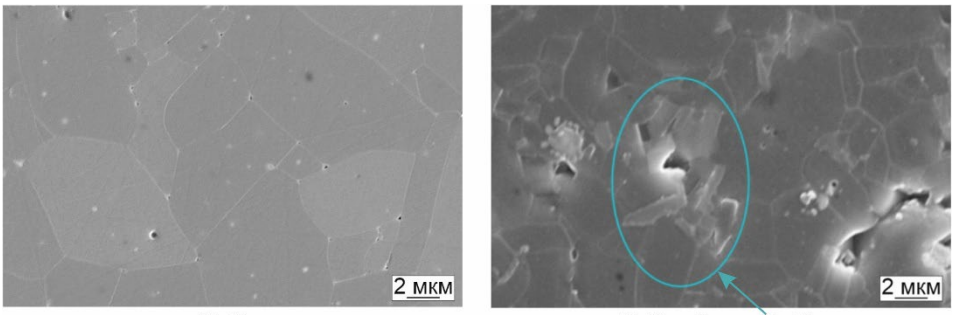


Рис. 2. Структура материалов спеченных при 1500 °C

Таким образом, фазовый состав подготовленных материалов представлен α-Al_2O_3 и $Ba_{0,83}Al_{11}O_{17,33}$. Наличие $Ba_{0,83}Al_{11}O_{17,33}$ обеспечивает сдерживание роста зерен Al_2O_3. С увеличением температуры спекания размер пластин гексаалюмината бария увеличивается, а размер зерен Al_2O_3 изменяется нелинейно.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-00256, https://rscf.ru/project/24-79-00256/. Эксперименты с использование синхротронного излучения проводили в ЦКП "Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения" (ЦКП СЦСТИ), ИЯФ СО РАН. Исследования проведены на оборудовании ЦКП «Структура, механические и физические свойства материалов», НГТУ.

Литература:

[1] Negahdari Z., Willert-Porada M., Pfeiffer C. // Materials Science and Engineering: A. 2010. Vol.527(12). P. 3005-3009.
[2] Podzorova L.I., Kutuzova V.E., Il'ichyova A.A. [et al] // Inorganic Materials: Applied Research. 2022. Vol.13(5). P. 1318-1323.
[3] Liu L., Takasu Y., Onda T. [et al] // Ceramics International. 2020. Vol.46. P. 3738-3743.

СД-II-03

Резонансно-аномальная рефлектометрия ионов Rb+ на поверхности кремнеземных гидрозолей

Тихонов А.М.[1,3], Волков Ю.О.[2,3]
1 – Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, Москва, Россия
2 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
3 – Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия
volkov.y@crys.ras.ru

Пространственное распределение ионов электролита вблизи заряженных поверхностей имеет основополагающее значение для анализа широкого спектра поверхностных явлений на коллоидных средах. В работе по данным резонансно-аномальной рентгеновской рефлектометрии с использованием синхротронного излучения в окрестности К-края поглощения атома рубидия (≈ 15.21 кэВ) изучено распределение левитирующих ионов Rb^+ на поверхности кремнеземных гидрозолей (коллоидных водных растворов наночастиц SiO_2 с характерными размерами 5 нм и 27 нм).

Метод резонансно-аномальной рефлектометрии [1] основан на зависимости фактора атомного рассеяния от энергии зондирующего излучения: $f(q,E) = f_0(q) + f'(q,E) + if''(q,E)$. При этом нерезонансная часть структурного фактора $F_0(q)$, пропорциональная распределению электронной плотности $\rho_e(z)$ на межфазной границе, может быть рассчитана путем решения обратной задачи рефлектометрии для угловой зависимости зеркального отражения $R_0(q)$ [2], тогда как резонансная часть $\delta F(q,E)$ определяет соотношение кривых отражения $R(q,E)/R_0(q)$, измеренных под и над краем поглощения искомого атома:

$$\frac{R(q,E)}{R_0(q)} = 1 + 2\left|\frac{\delta F}{F_0}\right| cos[\Delta\Phi(q,E)] + \left|\frac{\delta F}{F_0}\right|^2$$

где $\Delta\Phi(q,E)$ — зависящая от энергии разность фаз структурных факторов.

Экспериментальные кривые были измерены на станции X19C синхротрона NSLS (Брукхэвен, США) [3] при энергиях фотонов 15.0 кэВ (λ ≈ 0.825 Å), 15.2 кэВ (λ ≈ 0.814 Å) и 15.3 кэВ (λ ≈ 0.810 Å).

Нами рассчитаны распределения ионов Rb^+ по глубине $C_V(z)$ в приповерхностном слое, а также предложена качественная модель для их описания. Оценочная поверхностная концентрация рубидия составила ≈ 4×10^{18} $м^{-2}$, при толщине обогащенного слоя ≈ 20 Å, что согласуется с оценками избыточной концентрации рубидия в изученных системах, полученными в предыдущих работах [4].

Благодарности: Расчетно-методическая часть работы выполнена в рамках Соглашения № 075-15-2025-458 с Министерством науки и высшего образования РФ. Теоретическая часть работы выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-12-00200).

Литература:

[1] Fenter P., Park C., Nagy K.L., and Sturchio N.C. // Thin Solid Films. 2007. V. 515. P. 5654-5659.
[2] Kozhevnikov I.V. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A. 2003. V. 508. P. 519-541.
[3] Schlossman M.L., Synal D., Guan Y. et al. // Rev. Sci. Instrum. 1997. V. 68. P. 4372.
[4] Tikhonov A.M. // J. Chem. Phys. 2009. V. 130. P. 024512.

СД-II-04

Особенности золотосодержащих стандартных образцов при определении микроколичеств золота методом РФА-СИ

Гаврилова К.С.[1,2], Трунова В.А.[1,2], Крупович Е.С.[1,2,3], Сороколетов Д.С.[4], Легкодымов А.А.[3,4]
1 – Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия
3 – Центр коллективного пользования «СКИФ» ФГБУ науки Федерального исследовательского центра «Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
4 – Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия
gks-2510-@mail.ru

Анализ микроколичеств благородных металлов (Ag, Au и др.) в рудах и продуктах их переработки представляет собой сложную аналитическую задачу из-за их низких концентраций и сложного матричного состава образцов. Перспективным методом для решения этой задачи является рентгенофлуоресцентный анализ с использованием синхротронного излучения (РФА-СИ), что подтверждается рядом современных исследований [1-3].

В работе на станции №3 (ВЭПП-3, ИЯФ СО РАН) методом РФА-СИ проведен недеструктивный анализ следовых элементов (согласно паспортным данным Sb, Ag, Au) в стандартных образцах руд и продуктах их переработки: СЗР-2 (золотосодержащая руда), СЗК-2 и СЗК-3 (флотоконцентраты золотосодержащей руды), СЗХ-3 (хвосты флотации золотосодержащей руды), ХО-1 (хвосты обогащения), ВТ-1 (руда сульфидная медно-никелевая). Экспозиция таблетированных проб (средней плотностью 1,7 г/см^3) проводилась в пучке синхротронного излучения размером 0,52-2*7 мм^2 в 1-3 точках образца.

Получены спектры флуоресценции с пиками, соответствующими K-линиям Sb, Ag (при энергии возбуждающих квантов 33 кэВ) и Lα-линии Au (при энергии возбуждающих квантов 11,6 кэВ). Получены первые результаты количественного анализа (таблица 1) выявленных следовых элементов по методу внешнего стандарта (с расчетом концентрации одного стандартного образца через нормировочный коэффициент другого стандартного образца) с помощью программ AXIL (Canberra Packard, Benelux) и Origin (версии 9.5.1.195).

На основании полученных данных, можно предположить, что меньшее отклонение от паспортных данных (полученных масс-спектральными, атомно-абсорбционными и атомно-эмиссионными методами анализа) при определении содержания следовых элементов в геологической матрице по K-линии связано с увеличением интенсивности флуоресценции при возбуждении K-линии. В то время как при детектировании сигнала по L-линии вместе с полезным сигналом флуоресценции в каналы счета импульсов мультиканального анализатора может попадать значительное количество шумов, приводящих к большему отклонению, чем при определении содержания элемента по K-линии. Также на значение отклонения при определении содержания золота в геологической матрице может влиять неравномерное распределение золота по объему пробы стандартного образца.

Таблица 1 – Результаты количественного анализа содержания Ag, Sb и Au в золотосодержащих стандартных образцах

Нормировочные коэффициенты	Концентрации Ag, г/т		Паспортные значения Ag. г/т
	СЗР-2 (золотосодержащая руда)	ХО-1 (хвосты обогащения)	
ХО-1	0,87 ± 0,16	-	1,1 ± 0,3
СЗР-2	-	0,73 ± 0,11	0,58 ± 0,07
Нормировочные коэффициенты	Концентрации Sb, г/т		Паспортные значения Sb, г/т
	СЗР-2 (золотосодержащая руда)	СЗХ-3 (хвосты флотации золотосодержащей руды)	
СЗХ-3	53,64 ± 9,65	-	40 ± 20
СЗР-2	-	14,17 ± 0,16	19 ± 7
Нормировочные коэффициенты	Концентрации Au, г/т		Паспортные значения Au, г/т
	СЗР-2 (золотосодержащая руда)	СЗК-2 (флотоконцентрат золотосодержащей руды)	
СЗХ-3	1,72 ± 0,14	не определялась	4,6 ± 0,9
СЗР-2	-	17,21 ± 1,25	33 ± 1

Благодарности: Работа проведена: в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ИНХ СО РАН (проект №125021001790-0); при частичной поддержке Программы «Приоритет-2030» в НГУ, стратегический проект «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий». ЦКП СЦСТИ (ИЯФ СО РАН) – за обеспечение источником синхротронного излучения и станции рентгенофлуоресцентного анализа.

Литература:

[1] L. Brinza et al. // Chemosphere, Vol. 270. 2021. article 129388.
[2] M. Warlo et al. // Ore Geology Reviews. Vol. 140. 2022. article 104620.
[3] H. Wei et al. // Acta Geologica Sinica. Vol. 97, no. 2. 2023. P. 501-512.

СД-II-05

Рентгеновская спектроскопия (XAS/RIXS) катодных материалов

Геонджиан А.Ю.[1], Аксенов Д.А.[2]
Центр энергетических технологий Сколтех, Москва, Россия
a.geondzhian@skoltech.ru

Данная работа посвящена теоретическому изучению влияния деинтеркаляции на электронную структуру катодных материалов с отрицательной энергией переноса заряда (NCT) и предсказанию экспериментально проверяемых характеристик, таких как спектры рентгеновского поглощения (XAS) и резонансного неупругого рентгеновского рассеяния (RIXS).

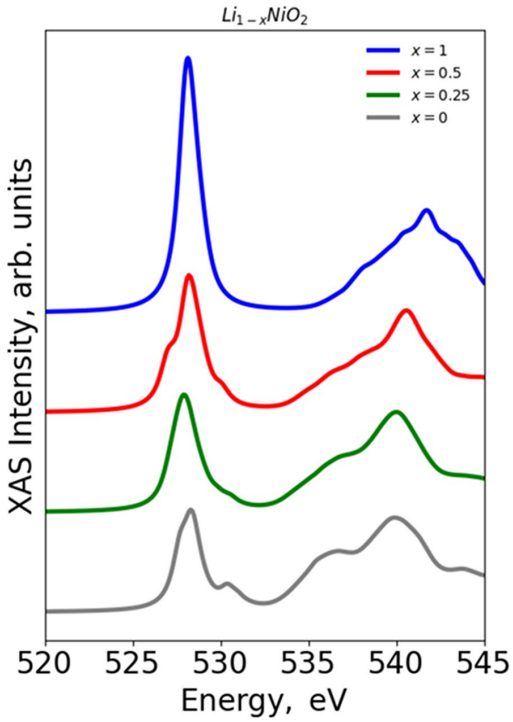


Рисунок 1. Рентгеновские спектры рассчитанные для K-края кислорода и разной концентрации Li в системе LNO.

В отличие от изоляторов Мотта, где сильные электрон-электронные взаимодействия приводят к появлению запрещенной зоны преимущественно *d-d*-типа, NCT-изоляторы характеризуются отрицательной энергией переноса заряда с лиганда на переходный металл. Таким образом, многочастичное состояние с дыркой на лиганде и дополнительным электроном на d орбиталях металла ($d^{n+1}\underline{L}^1$) становится энергетически более выгодным, чем $d^n\underline{L}^0$. В результате образуется начальное состояние, в котором p-зона кислорода расположена ближе к уровню Ферми, чем *d*-зона, и в некоторых случаях возникает запрещенная зона с *p-p*-характером [1].

Такое положение уровней сильно влияет на химическую активность элементов, поскольку состояния кислорода становятся более вовлечены в окислительно-восстановительные процессы во время деинтеркаляции лития [2]. В качестве примера NCT-изолятора и важного прототипа катодного материала с высокой энергетической емкостью рассматривается $LiNiO_2$ (LNO)[3,4].

Несмотря на формальное состояние окисления Ni *3+*, наши расчеты из первых принципов показывают, что Ni имеет конфигурацию $3d^8$ с дыркой, расположенной на орбиталях кислорода. Это указывает на значительную степень ковалентности и характер переноса заряда в этом материале. и непосредственно сказывается на изменениях в рентгеновских спектрах (XAS, RIXS) O *K* и Ni *L*-краев, в процессе зарядки катодного материала.

Наши результаты дают важные представления о электронной структуре и химическом поведении $LiNiO_2$ и связанных с ним NCT-изоляторов, что имеет значение для разработки передовых материалов для накопления энергии.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект No. 23-73-30003.

Литература:

[1] S.-T. Myung et al. // ACS Energy Letters. 2017. Т. 7. С. 196–223.
[2] R. Fantin et al. // ACS Energy Lettersers. 2024. Т.9. С. 1021.
[3] T. Mizokawa et al.// Physical Review Letters. 1991. Т. 67. С. 1638.
[4] H. Huang et al. // Nature Communications. 2023. Т. 9. С. 2112.

СД-II-06

Исследование остаточных напряжений в Ni-обогащенных слоистых оксидах лития и переходных металлов с градиентным распределением переходных металлов в объеме агломерата

Дихтяр Ю.Ю.[1,2], Статник Е.С.[1], Корсунский А.М.[1], Абакумов А.М.[1]
1 – Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
2 – Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
y.dikhtyar@skoltech.ru (yurydikhtyar@gmail.com)

Невозможно представить современный мир без устройств запасания электрохимической энергии – аккумуляторов. Потребность в них закрывают технологии на основе Li благодаря своим высоким электрохимическим характеристикам: высокой удельной разрядной емкости (до 220 мАч/г в окне потенциалов 2.7 – 4.3 V против Li/Li^+ анода) и высокой плотности энергии (до 800 Втч/кг) [1]. Основной компонент аккумуляторной системы, обеспечивающий ее свойства и вносящий основной вклад в стоимость – катод на основе, например, смешанного оксида Li и переходных металлов (ТМ) $LiNi_xMn_yCo_zO_2$ (NMC*xyz*, $x+y+z = 1$) с высоким ($x > 0.6$) содержанием Ni (так называемые Ni-обогащенные катодные материалы) и структурой α-$NaFeO_2$ (пр. гр. $R\bar{3}m$). Усилия исследователей по всему миру направлены на улучшение скоростных характеристик (снижению падения разрядной емкости при увеличении плотности тока), безопасности (снижение выделения молекулярного кислорода в процессе деградации материала) и циклического ресурса (сохранение емкости при длительном циклировании, трещиностойкость) аккумуляторов на основе NMC.

Гомо- и гетероваленотное замещение в подрешетках TM^{3+} и Li^+ не привело к значимому улучшению электрохимических свойств материалов [2], поэтому микроструктурная организация первичных частиц, а также градиентное распределение ионов переходных металлов в агломерате рассматриваются как наиболее перспективные способы улучшения обозначенных выше характеристик. Методы управления микроструктурной организацией важны также в контексте того, что вносят основной вклад в механические свойства получаемых материалов, ведь растрескивание при электрохимическом циклировании и последующая деградация как материала, так и электролита на поверхности трещин – основная причина падения емкости и выхода из строя аккумулятора. Цель работы – оценить величину остаточных напряжений в материалах NMC с градиентным распределением ТМ и радиальной ориентацией первичных частиц.

В качестве модельной системы выбран состав Ni : Co = 0.833 : 0.167. Агломерат в центре обогащен Ni, а ближе к краю частицы – Co (обозначение [Ni→Co]). Исходный гидроксидный прекурсор ($[Ni→Co](OH)_2$) с градиентным распределением Ni и Co синтезирован в реакторе соосаждения в присутствии комплексообразователя (гидроксида аммония). Из полученного гидроксидного прекурсора при помощи окисления раствором NaClO (~25%) синтезирован еще один с более высокой степенью окисления ТМ – [Ni→Co]OOH для возможного снижения диффузии переходных металлов во время высокотемпературного литирования. Полученные промежуточные соединения ($[Ni→Co](OH)_2$ и [Ni→Co]OOH) смешивали с избытком $LiOH×H_2O$,

нагревали и выдерживали при разных финальных температурах: 600°C, 650°C, 675°C, 700°C, 750°C и 800°C. Материалы охарактеризованы методами рентгеновской дифракции на поликристаллических образцах, а также проанализированы при помощи сканирующей электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии.

Исходные прекурсоры и материалы, полученные при 600°C обладают сохраненным градиентным распределением ТМ, а также радиальной ориентацией первичных частиц. Эти образцы исследованы при помощи метода широкоуглового рентгеновского рассеяния на станции «БИОМУР» Курчатовского специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов», оценены остаточные напряжения. Анализ диаграмм рассеяния показал, что высокотемпературное литирование приводит к уменьшению остаточных напряжений. Подобранный режим литирования также позволяет сохранить градиентное распределение ТМ, а использование предварительно окисленного прекурсора помогает управлять дефектностью получаемых образцов на уровне кристаллической структуры.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-73-30003

Литература:

[1] Chikkannanavar, S.B., Bernardi, D.M., Liu, L., 2014, J Power Sources. **248** 91–100.

[2] G. Ko, S. Jeong, S. Park, J. Lee, S. Kim, Y. Shin, W. Kim, K. Kwon, 2023, Energy Storage Mater. **60** 102840.

СД-II-07

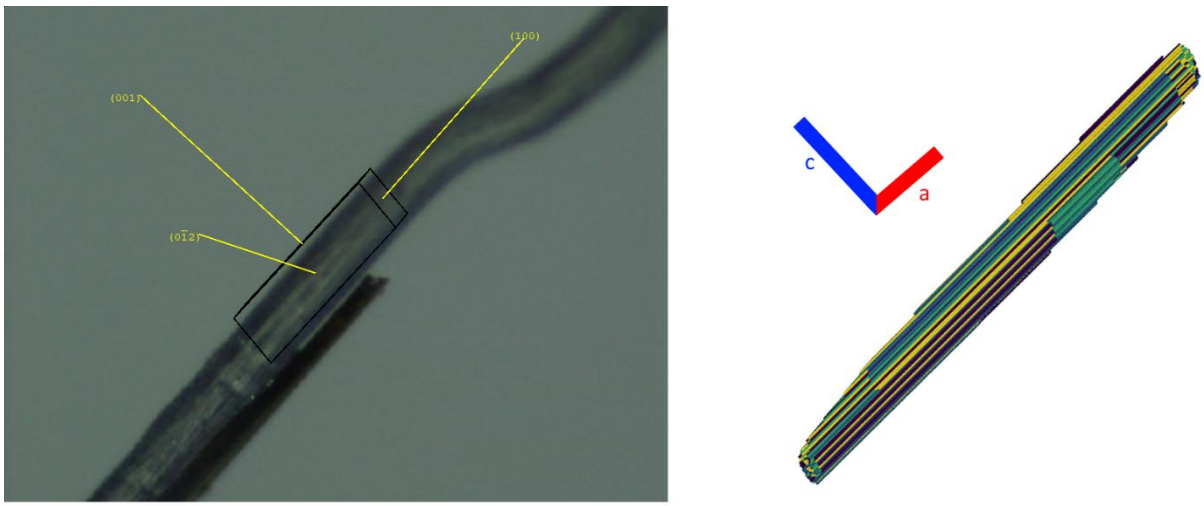
Комплексный подход к исследованию геометрии изгиба гибких органических кристаллов с использованием дифракционных методов (на примере пиразинамида и 1,3,5-трихлорбензола)

Дубок А.С.[1,2,3], Третьякова И.С.[3], Рычков Д.А.[2,3]
1 – НГУ, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП "СКИФ", р.п. Кольцово, Новосибирская область, Россия
3 – ИХТТМ СО РАН, Новосибирск, Россия
a.dubok1@g.nsu.ru

Кристаллы органических соединений являются перспективными материалами для гибкой электроники, фотоники и биосовместимой робототехники благодаря их уникальным свойствам, а также возможности тонкой настройки функциональности на молекулярном уровне [1]. Однако поиски способов их практического применения долгое время сдерживалось хрупкостью, присущей подавляющему большинству известных органических кристаллов. Преодолеть данное ограничение стало возможно с открытием класса пластически гибких органических кристаллов, способных к значительным деформациям без потери монокристалличности [2]. Несмотря на интенсивное изучение этого феномена в последние два десятилетия, механически гибкие кристаллы остаются редкими для молекулярных систем (не более 500 открытых примеров). При этом не до конца ясными остаются фундаментальные взаимосвязи между их кристаллической структурой и механическими свойствами.

Ключевой задачей для таких исследований является точное определение кристаллографической геометрии изгиба – идентификация граней (hkl) и направлений [uvw], по которым происходит деформация. Классические методы, основанные на рентгеновской дифракции, часто сталкиваются с техническими сложностями при идентификации граней, особенно для сильно дефектных кристаллов. Для решения этой проблемы в данной работе предлагается комплексный подход, сочетающий экспериментальные и вычислительные методы. Экспериментальный блок включает точное измерение межгранных углов с использованием оптической и электронной микроскопии и классическое индицирование дифракционными методами. Вычислительный блок работы включает расчет энергий методами теории функционала плотности и молекулярной механики (в том числе с учетом влияния среды растворителя) для моделирования равновесного габитуса кристаллов и симуляции роста кристаллов методом Монте-Карло.

Разрабатываемая методология апробируется на нескольких системах с различными свойствами: полиморфных модификациях пиразинамида, демонстрирующих пластическую гибкость (α-форма) и хрупкое поведение (δ-форма), а также на пластически гибких кристаллах 1,3,5-трихлорбензола. Сравнительный анализ этих модельных объектов позволяет верифицировать предлагаемый подход и создать надежный протокол для определения геометрии изгиба. Показаны перспективы применения синхротронных методов в предлагаемом подходе для более точного определения граней с близкими индексами (hkl) дефектных кристаллов.



а б

Рис. 1. (а) Индицирование граней кристалла α-формы пиразинамида (б) Габитус кристалла α-формы пиразинамида моделированный методом Монте-Карло

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Программы «Приоритет-2030», проект «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий», НГУ

Литература:

[1] Zhuo Z. et al. Research progress of mechanically flexible molecular crystals: From bending mechanisms to applications // Chemical Engineering Journal. 2022. Vol. 450. P. 138333.
[2] Reddy C.M., Padmanabhan K.A., Desiraju G.R. Structure−Property Correlations in Bending and Brittle Organic Crystals // Cryst Growth Des. 2006. Vol. 6, № 12. P. 2720–2731.

СД-II-08

Улучшение функциональных свойств хромоникелевой аустенитной стали методом вневакуумной электронно-лучевой наплавки Cr, Ni и B

Дударева А.А.[1], Эмурлавев К. И.[1,2]
1 – Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия
dudareva-alina@mail

Современное машиностроение предъявляет повышенные требования к износостойкости, жаропрочности и коррозионной стойкости конструкционных материалов [1]. Одним из направлений придания указанных характеристик материалам является создание защитных покрытий. Среди технологий нанесения покрытий, перспективной считается вневакуумная электронно-лучевая наплавка (ВЭЛН), позволяющая получать композиции, состоящие из основного металла и модифицированного упрочняющего слоя достигающего нескольких миллиметров [2, 3].

Цель данной работы – улучшение комплекса функциональных свойств стали 12Х18Н10Т путем формирования композиций «основной материал – композиционное матричное покрытие» методом ВЭЛН порошковых смесей.

Эксперименты по созданию модифицированного слоя проводились на ускорителе ЭЛВ-6 в ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН в воздушной атмосфере при следующих параметрах: энергия электронов – 2 МэВ, ток – 18 мА, скорость перемещения стальной заготовки – 10 мм/с. В качестве материала исследования применялась аустенитная хромоникелевая сталь 12Х18Н10Т. Для формирования покрытий использовались порошковые смеси Cr, Ni, B и флюс MgF_2, обеспечивающий защиту ванны расплава от взаимодействия с окружающей средой.

Методами рентгеновской дифракции на станции «Жесткая рентгеноскопия» ЦКП СЦСТИ (ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск) и сканирующей электронной микроскопии установлено, что модифицированный слой имеет дендритную структуру и содержит фазы α-Fe, γ-Fe, а также упрочняющие бориды типа Cr_2B. Микротвердость наплавленного слоя достигает 450 HV, что более чем в 2 раза превышает показатель основного материала (200 HV).

Износостойкость покрытий исследовалась в условиях сухого трения скольжения при возвратно поступательном движении по схеме «шар-плоскость» с контртелом из сплава ВК6 и была увеличена до 1,6 раз по сравнению с 12Х18Н9Т.

Оценка показателя жаростойкости измерялась по приросту массы образцов при температуре 900 °С в течении 100 часов и демонстрирует улучшение стойкости к окислению в 2,6 раза по сравнению с исходным материалом.

Благодарности: Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-79-00066, https://rscf.ru/project/23-79-00066/.
Настоящее исследование выполнено на оборудовании ЦКП "Структура, механические и физические свойства материалов" (соглашение с Минобрнаукой № 13.ЦКП.21.0034, 075-15-2021-698).

СД-II-08

Литература:

[1] Гуляев, А. П. Металловедение : учебник / А. П. Гуляев. – 3-е изд. – Москва : Металлургия, 1986. – 538 с. – Текст : непосредственный.

[2] Морфология боридов железа в поверхностном слое, наплавленном электронным лучом / И. А. Батаев, Н. В. Курлаев, О. Г. Ленивцева и др. – Текст : непосредственный // Обработка металлов: технология, оборудование, инстру-менты. – 2012. – № 1 (54). – С. 80–84.

[3] Дробяз, Е. А. Электронно-лучевая наплавка высокопрочных борсодер-жащих покрытий / Е. А. Дробяз. – Текст : непосредственный // Электронно-лучевая наплавка высокопрочных борсодержащих покрытий : материалы 15 междунар. науч.-техн. Урал. шк.-семинара металловедов – молодых ученых. – Екатеринбург : УрФУ, 2014. – С. 373–375.

СД-II-09

Использование синхротронного излучения для исследования процесса роста металлических пленок сплава TiNbZrTaHf

Иванов Ю.Ф.[1], Прокопенко Н.А.[1], Петрикова Е.А.[1], Ахмадеев Ю.Х.[1], Крысина О.В.[1], Коваль Н.Н.[1], Шмаков А.Н.[2]

1 – Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия

2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

yufi55@mail.ru

Одним из направлений разработки высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) является создание материалов на основе тугоплавких металлов Ti, Nb, Zr, Ta, Hf, W, Mo. Благодаря своим превосходным механическим характеристикам, термической стабильности и коррозионной стойкости ВЭС элементного состава TiNbZrTaHf был предложен в качестве перспективного кандидата для использования в высокотемпературных компонентах авиационных двигателей и лопатках турбин. Целью настоящей работы являлось исследование процесса формирования металлического покрытия на основе ВЭС состава TiNbZrTaHf, выполненное in-situ методом рентгенофазового анализа с использованием синхротронного излучения.

Материалом исследования являлись тонкие (2-3 мкм) пленки сплава TiNbZrTaHf состава, близкого к эквиатомному. Процесс формирования структуры тонких пленок in situ с высоким временным разрешением изучали, используя источник синхротронного излучения – накопитель электронов ВЭПП-3, ИЯФ СО РАН. Исследование проводили при нормальных условиях, используя сканирующий дифрактометр высокого разрешения (ИЯФ СО РАН); программное обеспечение – комплекс для структурного анализа MAUD (Material Analysis Using Diffraction), программа для обработки результатов измерений Fitykv.1.3.1. Характеристики синхротронного излучения: рабочая длина волны излучения λ = 0.101 нм; диапазон углов дифракции 2Θ : (20-80) градусов. Съемка и запись рентгенограмм осуществлялись в непрерывном режиме каждую минуту. Подложкой являлись образцы титана ВТ1-0 и твердого сплава ВК8 (WC-8%Co) размерами 10x10x5 мм. Формирование покрытий ВЭС осуществляли методами вакуумно-дугового плазменно-ассистированного осаждения на установке ВЭИПС-1, разработанной в ИСЭ СО РАН для исследования процессов формирования покрытий на источнике синхротронного излучения. Использовали спеченный катод состава TiNbZrTaHf, близкого к эквиатомному. Дефектную субструктуру пленки анализировали методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии (прибор JEM 2100F).

Методами микрорентгеноспектрального анализа установлено, что напыленные пленки имеют следующий элементный состав (ат.%): 40.4Ti-14.7Zr-15.2Nb-16.4Hf-13.3Ta. Методами просвечивающей электронной микроскопии показано, что пленки имеют столбчатую структуру, столбики сформированы кристаллитами, размеры которых изменяются в пределах 1-3 нм (рис. 1). Методами рентгенофазового анализа с использованием синхротронного излучения установлено, что на первой стадии напыления формируется β-фаза (ОЦК решетка, a = 0,34748 нм) (рис. 2, а). Одновременно с этим, в угловом интервале (24-25) град.

наблюдается поднятие фона дифракционной линии, указывающее на формирование аморфно-кристаллического состояния пленки. На завершающей стадии напыления в данном угловом интервале обнаруживаются дифракционные линии ω-фазы (гексагональная кристаллическая решетка, a = 0,46636 нм, c = 0,27872 нм) и α-фазы (ГПУ кристаллическая решетка, a = 0,31261 нм, c = 0,47846 нм).

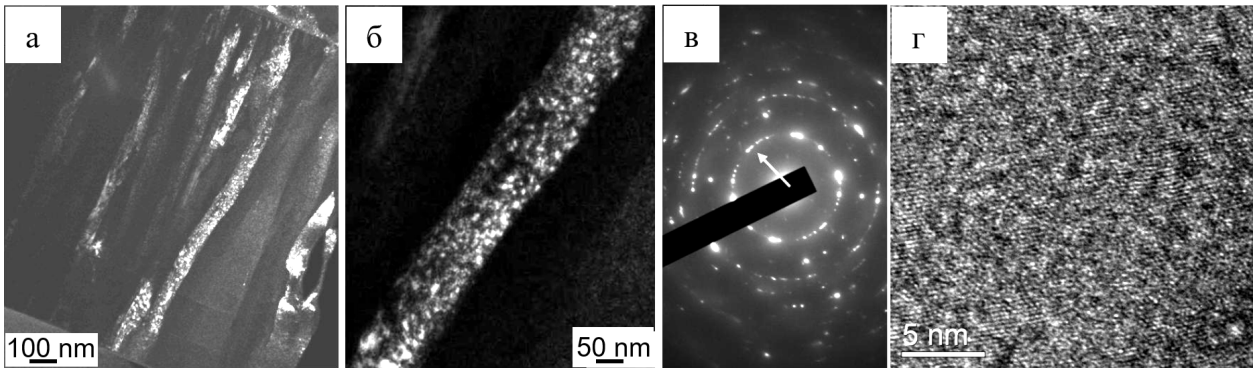


Рис. 1. Электронно-микроскопическое изображение структуры пленки ВЭС; а, б – темные поля, полученные в рефлексе [110]ВЭС (указан стрелкой на (в)); в – микроэлектронограмма; г – светлое поле.

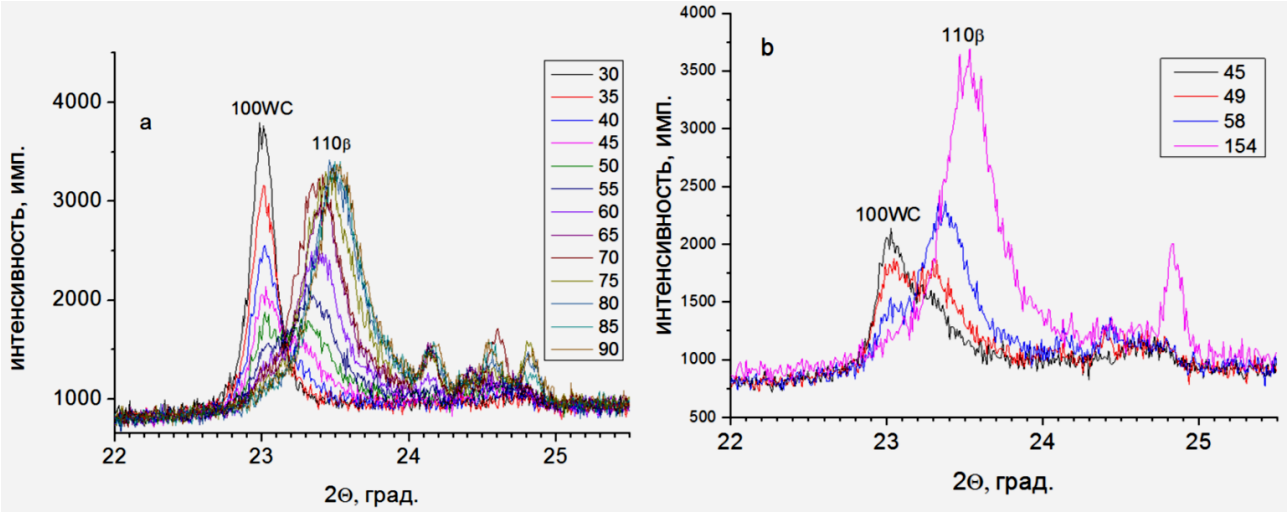


Рис. 2. Фрагменты рентгенограмм, полученных in situ в процессе формирования покрытия на основе ВЭС состава TiNbZrTaHf. Указаны времена съемки рентгенограмм (мин.).

Таким образом, осуществлены исследования in situ процесса формирования пленки на основе высокоэнтропийного сплава TiNbZrTaHf, выполненные методом рентгенофазового анализа с использованием синхротронного излучения. Выявлен многостадийный многофазный характер процесса роста пленки. Высказано предположение, что угловое уширение дифракционной линии (110) β-фазы может быть обусловлено расслоением пленки на наноразмерные области, различающиеся элементным составом. Применение in-situ исследований методами рентгенофазового анализа с использованием синхротронного излучения позволило выявить временные интервалы формирования и перестройки обнаруженных фаз.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 24-69-00074.

СД-II-10

Повышение точности исследования поликристаллических материалов при съемке в геометрии Дебая-Шеррера. Аттестация нового рентгенографического эталона Y_2O_3

Иванова Ю.А.[1,2], Кудрявцев А.Л.[1,2], Серебренникова П.С.[1,2], Громилов С.А.[1,2]
1 – Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
y.ivanova3@g.nsu.ru

В настоящее время большинство рентгенографических исследований поликристаллических фаз на лабораторных дифрактометрах проводится в геометрии Брэгга-Брентано. Однако наблюдается тенденция увеличения числа экспериментов в геометрии Дебая-Шеррера на монокристальных дифрактометрах, а также станциях СИ, оснащенных 2D-детекторами. К достоинствам схемы Дебая-Шеррера можно отнести малое количество образца и одновременную регистрацию всей дифракционной картины. Основной недостаток связан с необходимостью проведения калибровки прибора при изменении геометрии съемки и длины волны СИ. Как показывает практика, точность калибровок, проводимых по поликристаллическим эталонам, невысокая, в настоящей работе рассмотрены основные аспекты применения монокристаллических эталонов.

Основная цель работы – повышение точности измерений параметров элементарной ячейки (ПЭЯ) поликристаллических образцов. Для ее достижения предложено повысить точность калибровки за счет учета эксцентриситета (смещение центра образца при поворотах вокруг осей гониометра) эталонного монокристалла и исследуемого образца. Эксперименты проведены на дифрактометре Bruker D8 Venture (микрофокусная трубка, Cu$K\alpha$-излучение, трехкружный гониометр, D = 109 мм). В качестве внешнего эталона использован монокристалл $Bi_4Ge_3O_{12}$ (BGO) [1], значение a = 10.5188(2) Å, пр. гр. I-43d [2]. ПЭЯ BGO был уточнен с использованием внешнего эталона Ge по процедуре, учитывающей эксцентриситет образцов [3]. Уточненное значение a_{BGO} = 10.5186(3) Å далее использовалось при проведении калибровок гониометра.

Определены оптимальные условия съемки и необходимое число рефлексов для проведения корректной калибровки по программе SearchXY-2θ [4]. Эксцентриситет монокристалла BGO с линейными размерами <40 мкм учтен путем съемки при двух положениях по ω, отличающихся на 180°. Показано, что отклонения рефлексов от дифракционных дуг не превышают 0.006° 2θ. В идентичных геометрических условиях получены две дебаеграммы тестового образца – поликристаллического CeO_2 – SRM 674b (a = 5.41153(30) Å, пр. гр. Fm-3m) [5]. Выбор данного образца обусловлен необходимостью проверки предлагаемой методики, так как образец является признанным рентгенографическим эталоном. Для каждой дебаеграммы проведено интегрирование по результатам соответствующей калибровки. Определение ПЭЯ CeO_2 проведено по 5 независимым рефлексам (440, 531, 600, 620, 533), среднее значение $\langle a_{CeO2} \rangle$ = 5.4117(2) Å, что отличается от эталонного значения на 0.0002 Å. Относительная погрешность измерения $\Delta a/a$

$\approx 5\times10^{-5}$. Показано, что разработанная методика позволяет получить значение ПЭЯ с точностью, ограниченной лишь точностью гониометра.

Предложен новый рентгенографический поликристаллический эталон Y_2O_3. В качестве исходного образца был взят порошок Y_2O_3 чистотой 99.999% (ТУ 48-4-524-90, марка ИтО-В). По данным сканирующей электронной микроскопии размеры его зерен можно оценить на уровне до 0.4 мкм. Съемка в схеме Брэгга-Брентано на дифрактометре Shimadzu-XRD7000 (Cu$K\alpha$-излучение, внутренний эталон LaB_6 – ТУ 6-09-03-8-75, чистота 99.8%) привела к значению FWHM рефлекса (11 6 1)$_{Y2O3}$ 0.23° 2θ. После отжига на воздухе при температуре 1100°C в течение 15 суток это значение уменьшилось до 0.17° 2θ, при этом ПЭЯ a_{Y2O3} = 10.6047(4) Å не изменился, что свидетельствует о стабильности состава. В аналогичных геометрических условиях полуширины рефлексов (6 2 0) эталонного порошка CeO_2 (SRM 674*b*, [5]) и рефлекса (1 3 10) α-Al_2O_3 (SRM 676, [6]) равны 0.15° 2θ.

При уточнении ПЭЯ Y_2O_3 в схеме Дебая-Шеррера (дифрактометр Bruker D8 Venture) по описанной методике использовался режим съемки с ограничением интервалов изменения углов φ и ω, что обеспечило учет эксцентриситета эталона и образца по обеим осям. Среднее для двух положений образца значение 2θ рефлекса (10 8 2) равно 140.587°. Итоговое значение a_{Y2O3} = 10.6053(3) Å, относительная погрешность измерения $\Delta a/a$ составила 3×10^{-5}.

Сравнение теоретических дифракционных картин наиболее распространенного эталона Si и Y_2O_3 показывает, что интенсивность рефлексов последнего выше, а число рефлексов больше, что может позволить проводить калибровку в малых угловых интервалах. Аттестованный эталон Y_2O_3 (далее Y_2O_3-NIIC-A) немного уступает традиционным эталонам по полуширине рефлексов, однако превосходит по ряду характеристик, в том числе и по доступности. Небольшое количество аттестованного эталона (до 60 мм^3) можно получить безвозмездно у авторов доклада для проведения межлабораторных сравнительных измерений.

Более подробно с данной работой можно ознакомиться в нашей статье [7].

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда и Правительства Новосибирской области (проект № 24-22-20017, https://rscf.ru/project/24-22-20017/).

Литература:

[1] Borovlev Y.A. et al. // Journal of Crystal Growth. 2001. V. 229. P. 305–311.
[2] Иванова Ю.А. и др. // XVI Симпозиум с международным участием «Термодинамика и материаловедение (ТиМ-2025)». Тезисы докладов. Санкт-Петербург, СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2025. С. 157.
[3] Serebrennikova P.S. et al. // CrystEngComm. 2024. V. 26. № 16. P. 2207–2218.
[4] Panchenko A.V. et al. // J. Struct. Chem. 2023. V. 64. № 8. P. 1399-1411.
[5] Small J.A., Choquetti S.J. Standard Reference Material 674b. Certificate. National Institute of Standard and Technology. 2017, 7 p.
[6] Kaizer D.L., Waters R.L. Standard Reference Material 676. Certificate of Analysis. National Institute of Standard and Technology. 2005, 5 p.
[7] Иванова Ю.А. и др. // Журн. структурн. химии. 2025. Т. 66. № 10. 154688.

СД-II-11

Функция аппаратурного искажения для моделирования структуры рентгеновских и рентгеноэлектронных спектров

Коротаев Е.В.
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия
korotaev@niic.nsc.ru

Современные методы квантовой химии достигли значительных успехов в моделировании и исследовании кристаллической структуры, электронной структуры, а также свойств соединений. При этом для верификации результатов соответствующих расчетов необходимо привлечение экспериментальных методов исследования, поскольку расчеты базируются на приближениях, а, зачастую, на подборе параметров (базисы, обменно-корреляционные потенциалы и тд.) и поправках [1].

Рентгеновская и рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия могут выступать в качестве экспериментальных методов исследования для проверки корректности квантово-химических расчетов. Преимуществом данных методов может служить селективность с точки зрения исследования распределения занятых и свободных состояний, сопоставимая с методами квантовой химии. Это особенно ценно, так как свойства веществ в той или иной мере связаны с особенностями электронного строения. Вместе с тем, структура рентгеновских или рентгеноэлектронных спектров, хотя и связана с распределением электронной плотности, но не тождественна ей в силу наличия аппаратурного искажения и ширины внутреннего уровня [2,3].

Экспериментальный рентгеновский спектр может быть представлен в виде уравнения типа свертки

$$F(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(E)\varphi(E - E_0)dE$$

где E - энергия фотона, $F(E)$ - искаженная аппаратурой экспериментальная кривая, $f(E)$ - истинная форма кривой, $\varphi(E\text{-}E_0)$ - функция искажения, E_0 - спектральное положение предельно узкой линии, результатом искажения которой является $\varphi(E\text{-}E_0)$.

Уравнение может быть использовано как для моделирования рентгеновских или рентгеноэлетронных спектров на основании рассчитанных распределений плотностей состояний (известна $f(E)$), так и для исправления экспериментальных спектров (известна $F(E)$). Функция искажения в том или ином случае чаще всего неизвестна и постулируется. В качестве функции аппаратурного искажения при моделировании рентгеновских спектров выбирается либо функция Гаусса, либо свертка от функций Лоренца или Гаусса. Выбор вида функции аппаратурного искажения, как правило, осуществляется методом подбора по наилучшему соответствию теоретических и экспериментальных спектров. Данный подход распространен для рентгеновских фотоэлектронных спектров, но также применяется и для рентгеновских спектров поглощения. Таким образом, наблюдается определенный «произвол» в выборе типа функции аппаратурного искажения.

В настоящей работе уравнение типа сверти было использовано для нахождения функции аппаратурного искажения в табулированном виде на основе распределений плотностей состояний (DFT, пакеты BAND и FDMNES) и экспериментальных рентгеновских и рентгеноэлектронных спектров ряда модельных соединений. Полученные с использованием метода регуляризации по Тихонову функции аппаратурного искажения позволили получить хорошее соответствие между экспериментальными и теоретическими К-краями поглощения меди для оксидов CuO, Cu_2O, Lα-спектрами меди и рентгеноэлектронными спектрами валентных полос для слоистого дисульфида меди-хрома $CuCrS_2$.

Литература:

[1] Ю.А. Изюмов, В.И. Анисимов // Электронная структура соединений с сильными корреляциями. М.-Ижевск: R&C Dynamics. 2009. 375 с.

[2] А. Майзель, Г. Леонхардт, Р. Сарган //Рентгеновские спектры и химическая связь. Киев: Наук. Думка. 1980. 420с

[3] М.А. Блохин // Методы рентгеноспектральных исследований. М: ГИТЛ. 1959. 386с.

[4] А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин // Методы решения некорректных задач. М: Наука.1979. 285с.

СД-II-12

Применение метода рентгеновской рефлектометрии для исследования свойств тонких пленок, полученных при разных режимах вакуумного напыления

Коченева А.Г.[1,2], Шарафутдинов М.Р.[1,2], Лемзяков А.Г.[1,2]
1 – ИЯФ СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП "СКИФ", Кольцово, Россия
anna.kocheneva@gmail.com

Основная цель проделанной работы - определить взаимосвязь между режимом вакуумного напыления со свойствами получаемых покрытий. В дальнейшем планируется применять полученные зависимости для напыления покрытий с заданными свойствами для решения разных научных задач, например, для проведения экспериментов в области терагерцовой оптики или создания многослойных рентгеновских зеркал.

Исследование покрытий методом рентгеновской рефлектометрии производилось с использованием синхротронного излучения на экспериментальной станции "Дифракционное кино" на накопителе ВЭПП-3. Метод основан на измерении отражательной способности рентгеновских лучей поверхностью материала вблизи критического угла полного внешнего отражения. Метод рентгеновской рефлектометрии позволяет производить неразрушающий анализ как однослойных, так и многослойных покрытий и определять их параметры, такие как толщина, плотность, а также шероховатость поверхности и интерфейса.

В качестве экспериментальных образцов исследовались золотые покрытия на стеклянных и кремниевых подложках. Металл на подложки наносился методом магнетронного напыления. В ходе напыления изменялись следующие параметры режима работы установки: давление газа и температура подложки.

В докладе будет представлена конструкция экспериментальной станции, описание режимов вакуумного напыления и полученные на данном этапе результаты.

СД-II-13

Метод РФА-СИ для анализа биофункциональных групп химических элементов в красном костном мозге у пациентов с гемобластозами

Крупович Е.С.[1,2,3], Трунова В.А.[1,3], Войтко М.С.[4], Гаврилова К.С.[1,3]

1 – Институт неорганической химии им. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук", Новосибирская область, Кольцово Россия

3 – Новосибирский национальный государственный исследовательский университет, Новосибирск, Россия

4 – Новосибирский государственный медицинский университет, Новосибирск, Россия

elena.krup42@gmail.com

Нарушения микроэлементного баланса могут выступать в качестве потенциального фактора, способствующего инициации опухоли. В частности, показано увеличение потребления кислорода и питательных веществ опухолевыми клетками, по сравнению со здоровыми тканями [1].

Метод РФА-СИ позволяет с высокой точностью определять концентрации макроэлементов и металлов, что важно для медицины, а избирательное возбуждение дает возможность определять содержание элементов, линии флуоресценции которых пересекаются.

Проведен элементный анализ проб красного костного мозга пациентов с онкогематологическими патологиями методом рентгенофлуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения (РФА-СИ). Анализ проводился на базе Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучения в ИЯФ СО РАН на накопителе ВЭПП-3, станция № 3. В биопсийном материале определяли следующие химические элементы: S, Cl, K, Ca, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Br, Rb, Sr, Mo, Cd, I, Sb, La. Обработка результатов проводилась с помощью программ AXIL и PyMca. Статистический анализ полученных результатов проведен с использованием программы Statistica 12 (Dell, США).

Для применения результатов анализа в медицинской практике предложено разделение всех проанализированных элементов (22) на биофункциональные группы, согласно их роли в организме в ходе проведения химиотерапии: структурные элементы, электролиты, металлоферменты. Различается скорость обмена этих групп – наиболее стабильны структурные элементы и металлоферменты в виде координационных соединений, более быстрым обменом обладают металлоферменты, участвующие в гидролитических реакциях, самым быстрым обменом обладают носители заряда (Na, K).

Систематически изучен обмен десяти элементов (Na, K, Mg, Ca, Zn, Mn, Fe, Co, Cu, Mo), в то время как роль в организме и механизмы обмена остальных элементов до конца не исследованы. В данной работе особое внимание уделено таким эссенциальным элементам как Se, Br, As, I и наименее изученным в организме человека – Rb, Sb.

РФА-СИ как недеструктивный метод анализа позволяет изучать концентрации широкого круга элементов без изменения состава образца, а также проводить сканирование с целью выяснения распределения элементов в тканях, что важно для этой работы.

Благодарности: Работа проведена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ИНХ СО РАН (проект № 125021001790-0). Работа была выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0040).

Литература:

[1] Peng. S., Xiao F., Chen M., Gao H.// Adv. Sci. 2021. V. 19;9(1): 2103836.

СД-II-14

Повышение точности измерения параметров элементарной ячейки монокристаллов с использованием дополнительного детектора

Кудрявцев А.Л.[1,2], Улыбин Д.А.[1,2,3]
1 – Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
3 – Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Института катализа СО РАН, Кольцово, Россия
kudryavtcevarteml@gmail.com

Целью настоящей работы является разработка метода уточнения параметров элементарной ячейки (ПЭЯ) монокристаллов на дифрактометрах, оборудованных двумерными детекторами. Стандартное определение ПЭЯ, например, средствами программы «*Cell now*» APEX3 [1] при обработке большого числа фреймов, дает относительную погрешность $\Delta d/d \approx 1\%$, ввиду неточностей приборной модели, недостаточного накопления пиков и неточности их обработки. Альтернативный подход, позволяющий уменьшить погрешность на два порядка с помощью внешнего эталона, описан в статье [2].

Для реализации метода были выбраны высокоугловые рефлексы Y_2O_3 (a = 10.6047(3) Å пр. гр. Ia-3) и BGO ($Bi_4Ge_3O_{12}$, пр. гр. I-43d), наблюдаемые в диапазоне углов 2θ 160÷163° при использовании излучения Cu$K\alpha$. В этом диапазоне располагается дублет $K\alpha_{1,2}$ рефлексов типа $\{10\ 9\ 1\}_{BGO}$, а также высокоинтенсивные {12 6 2} и низкоинтенсивные {13 4 1} рефлексы Y_2O_3. В качестве внешнего эталона использовался кристалл BGO с хорошо известными параметрами a = 10.5186(3) Å [3].

Образцы Y_2O_3 и BGO представляли собой совершенные монокристаллы размерами около 50 мкм. Эксперимент проводили на лабораторном монокристальном дифрактометре Bruker D8 Venture (микрофокусный источник Incoatec $I\mu S$ 3.0, Cu$K\alpha$-излучение, фиксированная χ-геометрия, CMOS-детектор PHOTON III). Ориентация кристаллов (*UB*-матрица [4]) была определена с использованием штатного детектора по программе «*Cell now*». Допустимый угол поворота штатного детектора $2\theta_D$ не позволяет регистрировать намеченные рефлексы. Углы φ и ω, необходимые для выведения рефлексов в отражающее положение в экваториальную плоскость, были рассчитаны с помощью программы James [5]. При этом, из трех указанных ранее семейств, были выбраны по одному рефлексу так, чтобы они вместе имели значения углов φ в минимально узком диапазоне, в нашем случае ≈ 2°. Это позволило уменьшить ошибки, связанные с центрировкой образца. Для съемки выбранных рефлексов использовался внешний детектор ADVACAM MiniPIX Edu, контролируемый с помощью Python-скриптов (использован PIXet API детектора). Он был закреплен в участке экваториальной плоскости, соответствующем требуемому диапазону углов 2θ.

В результате ω-сканирования были получены профили трех дублетов: $(-9\ -10\ -1)_{BGO}$ и (12 2 6), $(13\ -1\ -4)_{Y2O3}$, которые были аппроксимированы двумерными гауссианами методом наименьших квадратов. Таким образом, были получены координаты (X, Y) соответствующих пиков.

Пик	Амплитуда	*X*, пикс.	*Y*, пикс.	2θ,°	*a*, Å
$K\alpha_1$ (-9 -10 -1)$_{BGO}$	1556.98	235.75	124.06	162.19 (выч.)	10.5186
$K\alpha_2$ (-9 -10 -1)$_{BGO}$	697.03	235.69	180.34	164.12 (выч.)	10.5186
$K\alpha_1$ (12 2 6)$_{Y2O3}$	2861.82	235.70	68.17	160.28	10.6054
$K\alpha_2$ (12 2 6)$_{Y2O3}$	1290.09	236.08	119.71	162.05	10.6047
$K\alpha_1$ (13 -1 -4)$_{Y2O3}$	332.17	247.75	185.74	164.30	10.6048

Вычислив точные углы 2θ для BGO, по его дублету была построена линейная зависимость угла 2θ от координаты *Y* детектора. По этой зависимости были определены углы 2θ для рефлексов Y_2O_3. Рассчитанные из этих углов ПЭЯ оказались равны 10.6054, 10.6047 и 10.6048 Å соответственно. Экспериментальная относительная погрешность определения ПЭЯ таким образом составила около $3 \cdot 10^{-5}$. Среднее значение равно 10.6050(3) Å. Данное значение в пределах погрешности согласуется с данными исследования этого же монокристалла Y_2O_3, для которого было получено значение *a* = 10.6046(2) Å [6]

Использованная методика может быть реализована на дифракционных станциях ЦКП СКИФ. Установка дополнительного детектора в области больших углов $2\theta \approx 175^\circ$ позволит проводить прецизионное измерение ПЭЯ с $\Delta d/d \approx 10^{-6}$.

Благодарности: к.х.н. Комарову В.Ю., м.н.с. Серебренниковой П.С. и д.ф.-м.н. Громилову С.А. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда и Правительства Новосибирской области (проект № 24-22-20017, https://rscf.ru/project/24-22-20017/).

Литература:

[1] APEX3 Software Suite. – Madison, WI, USA: Bruker AXS Inc. – 2019.
[2] Серебренникова П.А., Громилов С.А. // Журн. структур. химии. — 2022. — Т. 63, № 8. — 95631.
[3] Иванова Ю.А. [и др.] // Журн. структур. химии. — 2025 – Т. 66, № 10. — 154688.
[4] Busing W.R., Levy H.A. // Acta Crystallogr. – 1967. – Vol. 22, No. 4. – C. 457-464.
[5] Кудрявцев А.Л. [и др.] // Журн. структур. химии. — 2024. — Т. 65, № 10. — 133158.
[6] Серебренникова П.А., Громилов С.А. // Журн. структур. химии. — 2025. — Т. 66, № 7. — 148915.

СД-II-15

Дозоэффективная рентгеновская микроскопия биологических образцов с нанометровым эффективным разрешением

Кутькин О.М.[1,2,3], Хомяков Ю.В.[2,3], Ракшун Я.В.[2,4], Скляров А.Н.[4], Веригин С.А.[4]
1 – Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
2 – Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия
3 – Центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия
4 – Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия
kutkino@list.ru

Прижизненное исследование процессов, протекающих на субклеточном масштабе (белковые комплексы, органеллы, вирусы), с помощью рентгеновской микроскопии ограничивается сопровождаемыми изменениями свойств образца из-за накапливаемой дозы. Это обусловлено тем, что при уменьшении размера интересующей особенности, количество фотонов, необходимое для формирования изображения с контрастом достаточным для интерпретации процесса, изменяется обратно пропорционально квадрату достигаемого разрешения [1]. Отдельные стадии без динамики можно наблюдать с помощью криофиксации, при которой процесс останавливается и изменение свойств образца не важно, но необходимо сохранение пространственного распределения электронной плотности. Подобный способ изучения отдельных фаз также применяется с помощью коротких импульсов лазера на свободных электронах, когда за время выдержки кадра образец не успевает претерпеть значимых изменений, но разрушается после получения изображения (diffraction before distraction).

Для изучения биологических объектов и происходящих процессов в нативном состоянии было предложено использование нейросетевой постобработки недоэкспонированных рентгеновских изображений с разрешением, достаточным для сохранения исходных качеств исследуемого образца [2]. В качестве примера дозоэффективного метода формирования рентгеновского изображения выбрана сканирующая просвечивающая рентгеновская микроскопия в окне прозрачности воды [3]. Достигаемое данным методом разрешение определяется размером зонда, а сейчас доступна высокоапертурная оптика нормального падения для объективов в мягком рентгеновском диапазоне, способная формировать нанометровую перетяжку в фокусе. При этом рабочая энергия находится в окне прозрачности воды, имеющего высокий естественный абсорбционных контраст для основных элементов органических веществ.

Согласно оценкам, несмотря на необходимость использования набора низкокачественных кадров (около 30), накапливаемая объектом во время выдержки доза меньше более чем на два порядка, по сравнению с одним изображения с высоким разрешением, что позволяет осуществлять прижизненное наблюдение биологических процессов.

Литература:

[1] Du M, Jacobsen C. Relative merits and limiting factors for x-ray and electron microscopy of thick, hydrated organic materials// Ultramicroscopy 2018; V. 184: p. 293–309. DOI:10.1016/j.ultramic.2017.10.003.

[2] Скляров А.Н., Хомяков Ю.В., Ракшун Я.В., Кутькин О.М., Веригин С.А. Молекулярно-клеточное рентгеновское кино// Компьютерная оптика 2025 [В печати]

[3] Chkhalo N.I., Malyshev I.V., Pestov A.E., Polkovnikov V.N., Salashchenko N.N., Toropov MN. Diffraction limited X-ray optics: technology, metrology, applications// Phys Usp 2020; V. 63: p. 67–82. DOI:10.3367/UFNe.2019.05.038601

СД-II-16

Структура и свойства защитных слоев на основе модифицированного медью $TiAl_3$, сформированных на титановых заготовках

Лазуренко Д.В.[1,2], Довженко Г.Д.[1,2], Александрова Н.С.[1,2], Шикалов В.С.[1], Кузьмин Р.И.[1]
1 – Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
2 – Центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов», Кольцово, Россия
Pavlyukova_87@mail.ru

Формирование интерметаллидных покрытий на титановых сплавах позволяет решать ряд практических задач, таких, например, как повышение стойкости их поверхности к окислению и износу. Эффективными с этой точки зрения являются покрытия на основе алюминидов титана. Известно, что наиболее стойким к высокотемпературному воздействию является $TiAl_3$ [1], однако максимальную защиту от изнашивания обеспечивают покрытия на основе Ti_3Al [2]. В недавней работе Diao с соавторами [3] показали, что модифицирование триалюминида титана переходным металлом (железом) позволяет повысить его стойкость к износу. В данной работе проводилась оценка использования модифицированного медью $TiAl_3$ в качестве износостойкого и жаростойкого покрытия на титановом сплаве.

Покрытия были сформированы методом вневакумной электронно-лучевой наплавки в два слоя. Для исследования покрытий использовали методы оптической и растровой электронной микроскопии, а также энергодисперсионной дифракции рентгеновского синхротронного излучения. Окисление проводили с использованием оборудования для термического анализа; износостойкость оценивали по схеме трения скольжения. Для интерпретации наблюдаемых явлений и механизмов деградации материалов при фрикционном нагружении и окислении также применяли компьютерное моделирование в рамках теории функционала плотности (ТФП).

Анализ структуры покрытия по глубине позволил установить, что $L1_2$-$Ti(Al_{1-x}Cu_x)$ являлась основной фазой в покрытии (рис. 1). Энергодисперсионный анализ основной части наплавленного слоя, представленной преимущественно $L1_2$ фазой, показал, что соотношение элементов в ней соответствовало двухфазной области $L1_2$-$Ti(Al_{1-x}Cu_x)_3$+$TiAl_2$ на диаграмме состояния при 450 °C. Учитывая, что $TiAl_2$ не растворяет медь, а ее концентрация в данной зоне была не ниже 6 ат. %, можно заключить, что в покрытии зафиксировалось высокотемпературное состояние. Сопоставление экспериментальных данных с диаграммой проекций ликвидуса позволило установить, что состав анализируемой зоны лежит на границе Ti_2Al_5 и $L1_2$-$Ti(Al_{1-x}Cu_x)_3$. Расчет энергии Гиббса показал, что при одинаковом составе более вероятным является формирование $L1_2$-$Ti(Al_{1-x}Cu_x)_3$. Однако, локальные флуктуации состава, вероятно, могут приводить к выделению Ti_2Al_5, малоинтенсивные пики которого были зафиксированы на экспериментальных дифрактограммах.

Элементный и фазовый состав верхней и нижней зон наплавленного слоя отличался от основной части покрытия. На поверхности были зафиксированы отдельные островки, представленные смесью $L1_2$-$Ti(Al_{1-x}Cu_x)$, $D0_{22}$-$TiAl_3$ и θ-Al_2Cu, что соответствует сечению

тройной диаграммы состояния при 450 °С. Элементный состав слоя, прилегающего к границе раздела с титаном, был крайне неоднородным. Анализ отдельных участков данного слоя показал, что у границы раздела, наряду с соединениями близкого к стехиометрии состава ($D0_{22}$-$TiAl_3$ и θ-Al_2Cu), формировались сильно пересыщенные TiAl и $Ti(Al_{1-x}Cu_x)_3$, состав которых варьировался в широком диапазоне, а также метастабильные фазы, в частности $Al_{33}Cu_{66}$ с примитивной кубической решеткой.

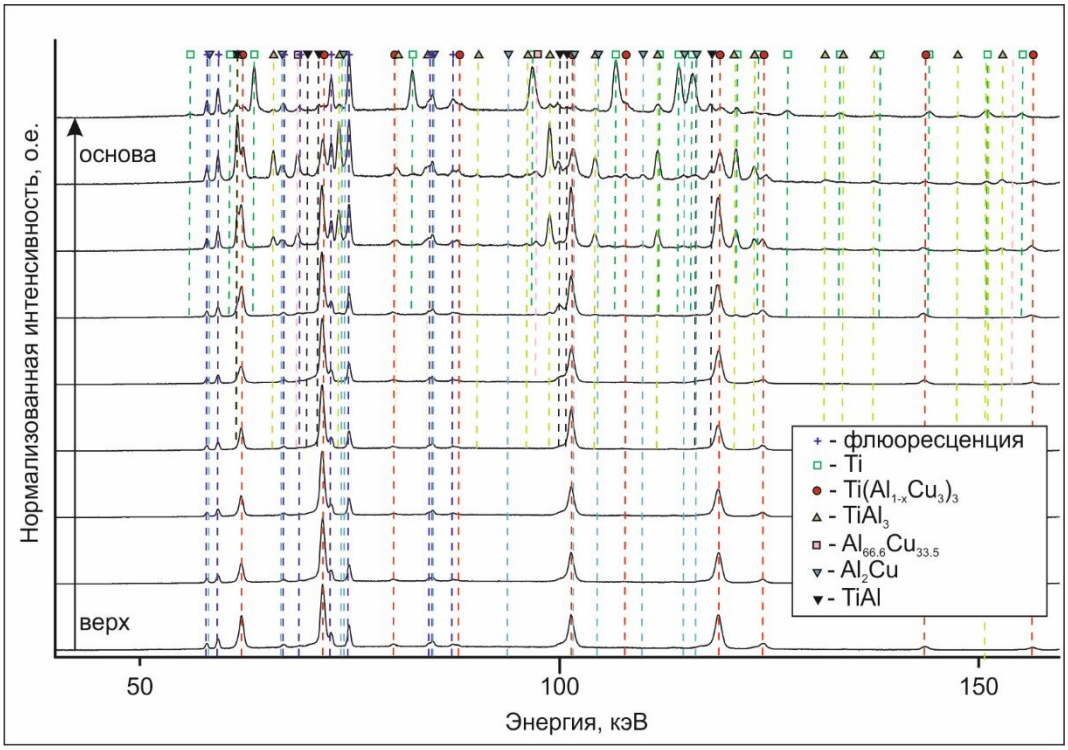


Рис. 1. Фазовый состав по глубине наплавленного слоя

Испытания по схеме трения скольжения показали, что износостойкость покрытия оказалась ниже, чем у материала основы. При этом в выбранных температурно-временных условиях (нагрев до 1200 °С с выдержкой 2 часа) наплавленный слой не окислялся. Таким образом, использование $L1_2$-сплава в может быть эффективным решением для защиты титана от окисления, однако его нанесение не предотвращает износ.

Благодарности: Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания FSUN-2024-0005 «Структурные преобразования в тонких поверхностных слоях металлических сплавов при экстремальном тепловом и деформационном воздействиях».
Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Структура, механические и физические свойства материалов», НГТУ.

Литература:

[1] Mitra R. // Taylor & Francis, 2015.
[2} Hirose A., Ueda T., Kobayashi K. F. // Materials Science and Engineering A. 1993. Vol. 160, Iss. 1. P. 143-153.
[3] Diao G., Yuan J., He A., Zhang D., Kumar A., Fang R., Vorobyev A., Chen W., Li D. // Lubricants. – 2024. Vol. 12. Iss. 11. Art. 398

СД-II-17

Исследование углеродных анодных материалов для аккумуляторов с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния

Лакиенко Г.П.[1,2], Фефелов М.А.[2], Бобылева З.В.[2], Дрожжин О.А.[2], Антипов Е.В.[1,2]

1 – Центр энергетических наук и технологий, Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

2 – Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

grigorylakienko@gmail.com

Потребность в системах накопления энергии растет с каждым годом, и в роли таких систем могут использоваться натрий-ионные аккумуляторы (НИА). Графит, который применяют как анодный материал в литий-ионных аккумуляторах, не подходит для использования в НИА в связи с небольшой удельной емкостью.

В качестве альтернативы можно рассмотреть более разупорядоченные углеродные материалы с преимущественно sp2-гибридизацией, такие как неграфитизируемый углерод (hard carbon) или графитизируемый углерод (soft carbon). Одним из способов накопления заряда в неграфитизируемом углероде считается заполнение натрием микропор, которые находятся между искривленными графеноподобными слоями. Обычно такие поры закрыты как для электролита, так и для многих газов. Одним из немногих способов исследования закрытой пористости является метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Суть метода заключается в анализе кривых когерентного диффузного рассеяния монохроматических рентгеновских лучей вблизи первичного луча на апериодических флуктуациях электронной плотности в материалах (напр., при наличии микропор в твердом теле) [1].

В работе сравниваются материалы на основе неграфитизируемого углерода, полученного из разных источников (глюкоза, фенолформальдегидная смола) и разными методами (гидротермальная и воздушная предобработка), а также на основе графитизируемого углерода из нефтяного пека и синтетических полимеров.

Малоугловое рассеяние сначала углей, а затем углеродов из сахаров было успешно смоделировано с использованием приближения поровой матрицы на основе автокорреляционной функции, полученной Дебаем [2]. Его мы и использовали в своей работе для описания экспериментальных кривых рассеяния, которые были получены в Курчатовском источнике синхротронного излучения ("КИСИ-Курчатов") на экспериментальной станции БиоМУР.

Мы сравнили кривые и рассчитали средний размер микропор образцов полученных из разных источников. Также мы исследовали с помощью МУРР эволюцию пор во время карбонизации прекурсоров. Используемая модель позволяет извлечь только средний размер пор, и не позволяет полноценно исследовать закрытую пористость материала. Поэтому в дальнейшем планируется использовать более сложные модели для обсчета кривых МУРР.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-23-20052

Литература:
[1] Saurel D. et al. A SAXS outlook on disordered carbonaceous materials for electrochemical energy storage //Energy Storage Materials. 2019. Т. 21. С. 162-173.
[2] Stevens D. A., Dahn J. R. An in situ small-angle X-ray scattering study of sodium insertion into a nanoporous carbon anode material within an operating electrochemical cell //Journal of The Electrochemical Society. 2000. Т. 147. №. 12. С. 4428.

СД-II-18

Использование высокоэнергетического рентгеновского синхротронного излучения (60-120 кэВ) накопительного кольца ВЭПП-4М для количественного анализа РЗЭ методом РФА-СИ

Легкодымов А.А.[1,2], Лапшин К.А.[1,2], Золотарёв К.В.[1,2]
1 – ЦКП «СКИФ» Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия
a.a.legkodymov@srf-skif.ru

Рентгенофлуоресцентный анализ с использованием синхротронного излучения (РФА-СИ) является мощным методом определения элементного состава различных образцов с высокой чувствительностью. Этот метод подходит для неразрушающего многоэлементного анализа. Спектры РФА-СИ получены на станции синхротронного излучения (СИ) с использованием излучения из 9-полюсного вигглера на ВЭПП-4М в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения (СЦСТИ).

В докладе представлены основные фоновые факторы (комптоновское и двойное комптоновское рассеяние) ограничивающие пределы обнаружения редкоземельных элементов (РЗЭ) в энергодисперсионной схеме РФА-СИ при использовании высокоэнергетического монохроматического синхротронного излучения (60-120 кэВ). Также приводятся первые экспериментальные результаты использования рефракционных рентгеновских линз для фокусировки высокоэнергетического монохроматического рентгеновского излучения.

Благодарности: Работа была выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] A. A. Legkodymov et al., Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics 83, 112-115 (2019).
[2] Zolotarev K.V., Legkodymov A.A. The code for processing of the SRXRF spectra. AIP Conference Proceedings (2020). DOI: 10.1063/5.0030556

СД-II-19

Применение алмазной ячейки для изучения фазовых диаграмм интерметаллических соединений методом порошковой рентгеновской дифрактометрии

Лихачева А.Ю.[1], Арсланов Т.Р.[2], Ращенко С.В.[1], Завьялов А.П.[3]
1 – Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
3 – Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
alih@igm.nsc.ru

Миниатюрная камера давления с алмазными наковальнями (DAC) и резистивным нагревом, в сочетании с рентгеновским излучением, является удобным инструментом для изучения структурного состояния вещества в широком диапазоне давлений и температур. Данная методика применена для изучения интерметаллических соединений на 4 станции ВЭПП-3 СЦСТИ (ИЯФ СО РАН).

Интерес к бинарным соединениям арсенида марганца (MnAs) и железо родия (FeRh) вызван их специфическими магнитными фазовыми превращениями, которые сопровождаются энтропийными эффектами и изменением кристаллической структуры под действием температуры и давления [1]. *P-T* фазовые диаграммы этих соединений изучены слабо; для FeRh выявлены противоречия в реализации магнитных/структурных фазовых превращений, а фазовая диаграмма MnAs представлена только магнитными измерениями в диапазоне давлений до 3.2 ГПа [2,3].

Исследовался сплав FeRh, содержащий, помимо основной фазы $Fe_{50}Rh_{50}$ fcc (простр. группа *Fm*-3*m*), около 4% Fe_3Rh_7 (*Fm*-3*m*). Дифрактограмма основной фазы индицируется как в ячейке с параметром a = 3.722(7) Å (отвечающей разупорядоченной структуре), так и в ячейке с удвоенным параметром a = 7.448(8) Å (упорядоченная по Fe и Rh структура с двумя различными позициями атомов Fe, отвечающая антиферромагнитной (АФ) и ферромагнитной (ФМ) фазе [4]).

При нагреве в области небольших давлений (< 0.5 ГПа) исходная fcc фаза $Fe_{50}Rh_{50}$ сохраняется вплоть до 200 °C, где она сменяется bcc фазой (простр. группа *Pm*-3*m*), отвечающей парамагнитному состоянию (ПМ) [4], Рис. 1.

При подъеме давления (T = 200-300 °C) дифракционная картина не меняется вплоть до 6.5 ГПа, когда на основном пике bcc фазы $Fe_{50}Rh_{50}$ появляется плечо на 2θ = 9.9° (Рис. 1). Мы связываем данный рефлекс с проявлением богатой Rh примесной фазы Fe_3Rh_7, на основании недавних расчетов, предсказывающих фазовые переходы в чистом Rh в области 7 ГПа [5]. По своему положению данное плечо отвечает основному рефлексу примитивной ячейки фазы, богатой родием. Пики основной bcc фазы $Fe_{50}Rh_{50}$ и примесной Fe_3Rh_7 (предположительно также имеющей bcc решетку) сохраняются до 350 °C и 9 ГПа, а также на сбросе *P*,*T* (Рис. 1).

Сопоставление полученных данных с фазовой диаграммой FeRh, построенной на основе магнитных измерений [4], позволяет заключить следующее. Повышение содержания Rh в сплаве существенно (на 200 °C) снижает температуру перехода из ферромагнитной в парамагнитную фазу и, таким образом, сокращает температурный диапазон устойчивости

ферромагнитной фазы в области 1-5 ГПа. Переход из ПМ в АФ фазу при 50-100 °С, наблюдающийся для $Fe_{50}Rh_{50}$ в области 4 ГПа [4], в нашем образце обнаружен не был. Можно предполагать сильный сдвиг этого перехода в обогащенном родием сплаве в область высоких давлений.

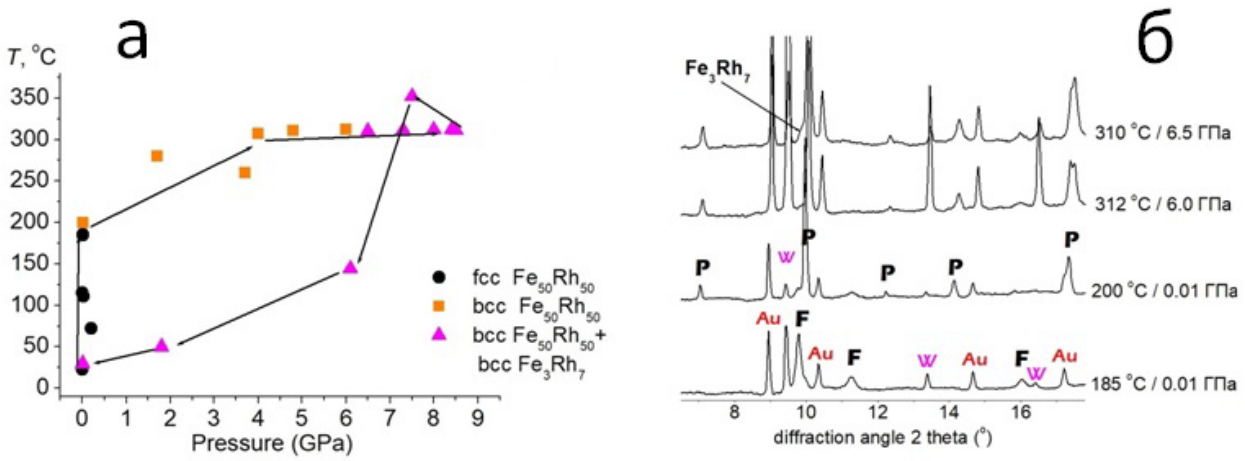


Рис. 1. а – Изменение P,T в ходе дифракционного эксперимента со сплавом FeRh и наблюдаемые фазы; б – дифрактограммы образца FeRh, показывающие переход из fcc (F) в bcc (P) фазу $Fe_{50}Rh_{50}$ и появление рефлекса, отнесенного к bcc фазе Fe_3Rh_7.

Предварительные дифракционные данные для MnAs показывают переход из гексагональной фазы низкого давления в орторомбическую (*B*31) в области 2.5 ГПа, и сохранение орторомбической структуры по крайней мере до 17 ГПа (при комн. *T*°). Похожий сценарий сообщается для MnP, в котором исходная *B*31 структура сохраняется вплоть до 15 ГПа, где далее наблюдался структурный переход в неизвестную фазу [6].

Построение барических зависимостей параметров решетки для орторомбической фазы MnAs позволит определить нижнюю по давлению границу существования высокобарической орторомбической фазы.

Таким образом, применение методики алмазной ячейки DAC в сочетании с синхротронным излучением позволило сделать существенный шаг на пути развития *P-T* фазовых диаграмм интерметаллических соединений, исследованных в настоящей работе.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-22-00324.

Литература:

[1] Joshi R., Karmakar S., Kumar K., Gupta M., Rawat R. // J. Appl. Phys. 2023. V. 133. P 173904.
[2] Menyuk N., Kafalas J.A., Dwight K., Goodenough J.B. // Phys. Rev. 1969. V. 177. P.942.
[3] Грибанов И.Ф., Завадский3.А., Сиваченко А.П. // ФНТ 1979. Т 5. С. 1219
[4] Vinokurova L.I., Vlasov A.V., Kulikov N.I., Pardavi-Horvath M. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 1981. V. 25. P. 201-206.
[5] Thakur B, Xuejun Gong X., Dal Corso A.//AIP Advances. 2024. V. 14. P. 045229.
[6] Yu Z. et al. //Journal of Physics: Condensed Matter 2017. V. 29. P. 254002.

СД-II-20

Фононная топология и особенности распределения спектрального веса в графите

Андрюшин Н.Д.[1], Суханов А.С.[1], Коршунов А.Н.[2], Павловский М.С.[3], Райн М.С.[1], Никитин С.Е.[3,4]
1 – Technical University of Dresden, Germany
2 – ESRF, Grenoble, France
3- Институт Физики СО РАН, Красноярск, РФ
4- Paul Scherrer Institut, Villigen, Switzerland
nikitin.stas.92@gmail.com

В то время как топологические свойства электронных состояний в графене исследованы всесторонне, фононный спектр этого материала и его трёхмерного аналога — графита — остаётся областью активных исследований. Ключевой особенностью электронной структуры графена являются Дираковские конусы в K-точках зоны Бриллюэна, ответственные за его аномальные транспортные свойства. В данной работе мы представляем комбинированное экспериментальное и теоретическое исследование топологии фононных зон в графите с использованием неупругого рассеяния рентгеновских лучей (IXS) и первопринципных расчётов.

Нами обнаружена пара фононных мод с линейной дисперсией, которые образуют слабый антикроссинг с минимальным расщеплением ~50 мкэВ вблизи K-точки. Наши расчёты показывают, что данное расщепление, обусловленное слабым межслоевым взаимодействием, что делает фононный спектр графита топологически тривиальным. Важно отметить, что величина этого антикроссинга может эффективно контролироваться внешним давлением, как гидростатическим так и одноосным.

Помимо дисперсии, мы детально проанализировали собственные вектора и распределение спектрального веса фононов вокруг K-точки. Мы обнаружили характерное гармоническое распределение спектрального веса при обходе этой точки, которое ранее предлагалось в качестве однозначного экспериментального свидетельства нетривиальной топологии и ненулевого числа Черна [2]. Однако наши результаты убедительно демонстрируют, что такое поведение спектрального веса является необходимым, но не достаточным условием для существования нетривиального топологического инварианта. Это заключение имеет важное значение для корректной интерпретации экспериментальных данных в подобных системах

Литература:

[1] N. D. Andriushin et al., Phys. Rev. Lett. **131**, 246601 (2024)
[2] Z. Jin et al., Phys. Rev. B **106**, 224304 (**2022)**

СД-II-21

Разработка методик проведения XAFS исследований на сверхпроводящем ондуляторе СКИФ

Овсянник В.В.[1,2], Золотарев К. В.[1,2]
1 – Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП СКИФ, Новосибирск, Россия
ovsyannik2013@mail.ru

На данный момент в мире существует около 50 действующих источников синхротронного излучения. На многих из них проводят исследования с использованием XAFS спектроскопии, но при этом в качестве источников излучения почти на всех используются поворотные магниты или вигглеры. Лишь на нескольких действующих станциях проводили XAFS исследования с использованием ондулятора. Так как спектры вигглера и поворотного магнита имеют непрерывную форму при их использовании процесс снятия XAFS спектра сводится к установке монохроматора на угол, отражающий необходимую энергию. Ондулятор обладает дискретным спектром, состоящим из набора гармоник разной энергии, и поэтому снять XAFS спектр используя ондулятор и просто изменяя угол монохроматора не получится.

Энергия гармоник ондулятора во многом определяется параметром ондуляторности, который в свою очередь зависит от величины магнитного поля ондулятора [1]. Соответственно, при изменении магнитного поля в ондуляторе можно изменять и энергию гармоники, тем самым как бы «перемещая» гармонику вдоль спектра излучения. В случае ондулятора на постоянных магнитах настройка поля в нем осуществляется посредством изменения зазора между полюсами ондулятора.

Основной проблемой, которая возникает при проведении XAFS на ондуляторе, является синхронизация поля ондулятора вместе с углом монохроматора, устанавливаемого под нужную гармонику. Так как гармонику нужно «перемещать» вдоль спектра, при помощи изменения поля ондулятора, угол монохроматора также необходимо перестраивать под измененную энергию гармоники, чтобы он каждый раз отражал максимум ее интенсивности. Одним из возможных вариантов такой синхронизации является установка корреляции между углом монохроматора и зазором ондулятора, в которой сначала устанавливается угол монохроматора, а вслед за ним настраивается зазор в ондуляторе [2].

Следует отметить, что ондулятор на станции 1-4 будет сверхпроводящим. Поле в таком ондуляторе предполагается настраивать с помощью катушек с током, а не посредством изменения зазора. Соответственно для проведения XAFS спектроскопии необходимо будет произвести синхронизацию изменения тока в катушках и угла монохроматора. Такая задача является качественно новой и ее решение требует соответствующих подходов.

По этим причинам, большой интерес представляет построение виртуальной модели проведения XAFS спектроскопии с использованием ондуляторного излучения и параметров станции 1-4. С помощью такой модели можно провести моделирование некоторых эффектов, возникающих при проведении XAFS экспериментов, и заложить для них соответствующие решения.

В рамках данной работы была создана виртуальная модель проведения XAFS исследований на сверхпроводящем ондуляторе в среде программирования Python с использованием программных пакетов для моделирования таких как XRT [3] и Spectra [4]. Схема виртуальной модели состоит из источника излучения сверхпроводящего ондулятора, двухкристального монохроматора с кристаллами кремния (Si111), двух ионизационных камер и образца между ними. А также были произведены моделирования проведения XAFS спектроскопии с использованием в качестве источника сверхпроводящего ондулятора.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” Института катализа СО РАН (FWUR-2025-0004.

Литература:

[1] N. A. Vinokurov, E. B. Levichev, Undulators and wigglers for the production of radiation and other applications, DOI: 10.3367/UFNr.0185.201509b.0917;
[2] Tomoaki Tanaka, Nobuyuki Matsubayashi, Motoyasu Imamuraa and Hiromichi Shimadaa, Synchronous scanning of undulator gap and monochromator for XAFS measurements in soft x-ray region, J. Synchrotron Rad. (2001). 8, 345-347, DOI: 10.1107/s090904950001414x;
[3] Konstantin Klementiev, Roman Chernikov, Powerful scriptable ray tracing package xrt, Advances in Computational Methods for X-Ray Optics III, edited by Manuel Sanchez del Rio, DOI: 10.1117/12.2061400;
[4] Takashi Tanaka, Hideo Kitamura, SPECTRA: a synchrotron radiation calculation code, Journal of Synchrotron Radiation 8(Pt 6):1221-1228, DOI:10.1107/S090904950101425X.

СД-II-22

Синхротронное излучение для испытаний полупроводниковых изделий электронной техники космического назначения

Орешко А.П.
МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
oreshkoap@my.msu.ru

Полупроводниковые изделия электронной техники (**ПИЭТ**) являются основой различных устройствах космической техники. Обширный фактический материал (см., например, [1]) показывает высокую чувствительность ПИЭТ к воздействию естественных ионизирующих излучений космического пространства (**ЕИИКП**) (заряженные частицы солнечных и галактических космических лучей, естественных радиационных поясов Земли). Поэтому проблема обеспечения радиационной стойкости (**РС**) ПИЭТ является одной из важнейших среди комплекса других традиционных проблем, связанным с разработкой высоконадежной и стабильной радиоэлектронной аппаратуры космического назначения.

Современная система прогнозирования РС ПИЭТ базируется на основном принципе, состоящем в переходе от моделирования характеристик ИИ к моделированию характеристик эффектов, вызванных ими в ПИЭТ [1]. Указанный принцип позволяет отказаться от рассмотрения специфики природы радиационного воздействия и перейти к анализу радиационных эффектов от этого воздействия путем экспериментального моделирования характеристик ИИ, доминирующих радиационных эффектов и показателей радиационной стойкости с использованием унифицированных моделирующих или имитирующих установок.

Для нужд ракетно-космической отрасли РФ, СТО ГК “Роскосмос” 04.01.0005–2022 [2] допускает использование лабораторных имитирующих установок – источников гамма-и рентгеновского излучения. При этом использование источников рентгеновского излучения осложняется вследствие их низкой интенсивности и широкого спектра.

Однако использование в качестве имитирующих установок источника синхротронного излучения с энергиями фотонов от 5 до 500 кэВ и длительностью импульсов излучения более 200 фс позволит решить не только проблему использования источников рентгеновского излучения для испытаний ПИЭТ на РС, но и отказаться от использования в качестве имитирующих установок источников гамма-излучения.

Благодарности: Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература:

[1] Яненко А.В., Никифоров А.Ю., Скоробогатов П.К., Чумаков А.И. Экстремальная электроника. М.: НИЯУ МИФИ, 2014. 244 с.

[2] СТО ГК Роскосмос 04.01.0005–2022. “Ракетно-космическая техника. База электронная компонентная. Порядок проведения испытаний с использованием типовых методик испытаний электронной компонентной базы на стойкость к воздействию ионизирующих излучений космического пространства по одиночным и дозовым эффектам с учетом специфики различных испытательных установок и оценкой их погрешностей”. М. 2022.

СД-II-23

Радиационная устойчивость полимерных рентгеновских составных преломляющих линз

Данилкин М.И.[1], Патолятов А.Д.[2], Переведенцева Е.П.[1], Колымагин Д.А.[2], Маттитал Р.П.[2], Пруцков Г.В.[3], Витухновский А.Г.[1,2]

1 – Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

2 – Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия

3 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

patoliatov.ad@phystech.edu

Источники СИ позволяют получать коллимированные пучки высокой яркости в рентгеновском диапазоне, что очень важно при исследовании материалов. Рентгеновские составные преломляющие линзы (СПЛ) можно выделить на фоне других приборов для фокусировки излучения [1] относительно малым фокусным расстоянием и достаточно высокой светосилой [2]. Слабое преломление рентгеновского излучения ($n \sim 1$) в материале обуславливает микрометровые размеры используемых СПЛ. Для создания структур с такими малыми параметрами применим метод двухфотонной лазерной литографии (ДЛЛ) [3], позволяющий изготавливать полимерные функциональные элементы любой формы с высоким пространственным разрешением. В материале на основе мономера и фотоинициатора в области перетяжки лазерного пучка высокой мощности происходит процесс двухфотонного поглощения излучения, что ведёт к образованию небольшого объемного элемента (вокселя). В результате послойной печати множество вокселей образуют объемные полимерные структуры (Рис. 1а).

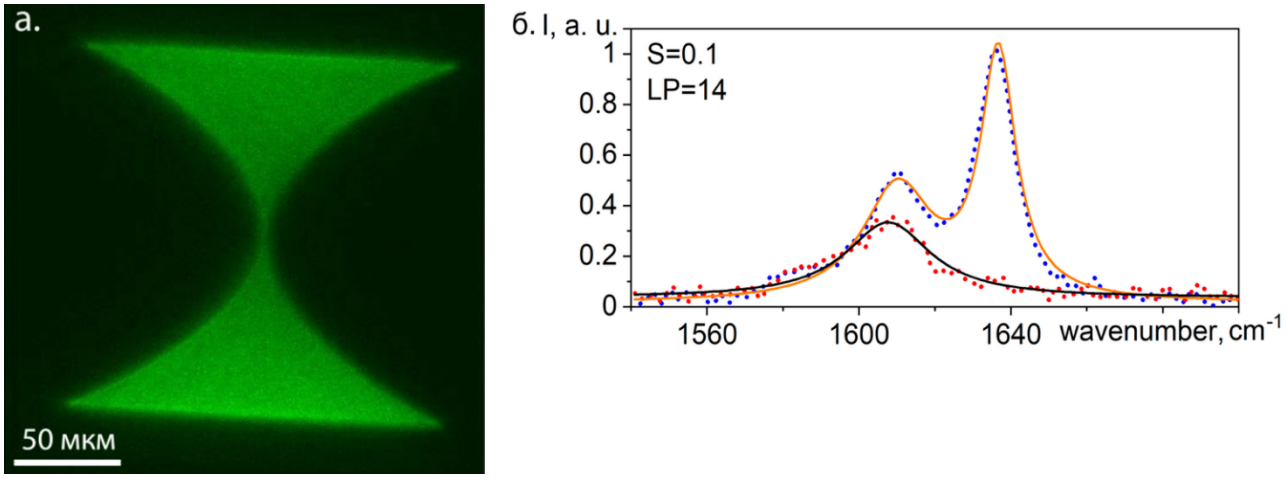


Рис. 1. а. Снимки в конфокальном микроскопе рентгеновской линзы, напечатанной в режиме сплошной заливки (slicing 1.2 мкм, hatching 1.0 мкм). б. Рамановский спектр для необлученного (синие точки) и облученного (красные точки) образца (при мощности лазерного излучения 7 Вт, расстоянии между слоями 100 нм).

Был поставлен опыт по исследованию радиационной устойчивости 6 полимерных кубов (50 ×50 × 50 мкм^3) при облучении пучком фотонов с энергией 12 кэВ (10^{10} фотонов/мм^2/с) на протяжении 55 часов [4]. Структуры изготавливались методом ДЛЛ с размером вокселя 300 ×

900 нм и варьированием расстояния между слоями от 100 до 400 нм. Мощность лазерного излучения составляла 7 мВт и 9 мВт. В качестве материала для изготовления была взята композиция, содержащая 49,5% PETA (пентаэритритритриакрилат, Sigma-Aldrich), 29,7% Bis-GMA (бисфенол А-глицидилметакрилат, Sigma-Aldrich) и 19,8% TEGDMA (триэтилдиметакрилат ленгликоля, Sigma-Aldrich). Методами электронной и оптической микроскопии наблюдалось уменьшение высоты на 25% и искажение формы полимерных кубов по сравнению с необлученными образцами. Это обусловлено изменением степени конверсии мономера в полимер при воздействии СИ. Анализируя рамановские спектры, снятые с необлученного и облученного образцов, можно обнаружить уменьшение интенсивности пика кратных C=C связей (1635 $см^{-1}$) (Рис. 1б).

Также методами рамановской спектроскопии исследовались облученные СИ (8, 12 кэВ) СПЛ (15 линз в ряду с апертурой 185 мкм, радиусом кривизны 45 мкм и высотой 185 мкм) Усреднённые данные рамановских спектров по первой и восьмой линзам в ряду показали уменьшение интенсивности пика, соответствующего кратным C=C связям (1635 $см^{-1}$) после воздействия СИ. Конверсия мономера в полимер в большей степени была выражена у первой линзы, чем у восьмой. Это объясняется тем, что первая линза приняла большую дозу излучения в следствие своего положения.

Преимущества ДЛЛ могут быть использованы для создания линз из более однородных по составу и более радиационно устойчивых материалов. Для этого планируется использовать технологию наноимпринт-литографиии. Создавая полимерные мастер-штампы произвольной формы с помощью ДЛЛ, можно расширить диапазон используемых материалов и масштабировать процесс производства оптических элементов для рентгеновского диапазона.

Литература:

[1] Gonzalez-Hernandez, D., Varapnickas, S., Bertoncini, A., Liberale, C., & Malinauskas, M.//Micro-optics 3D printed via multi-photon laser lithography. 2023. *Advanced Optical Materials*, T. *11*(1), 2201701.
[2] Snigirev, A., Kohn, V., Snigireva, I., & Lengeler, B//A compound refractive lens for focusing high-energy X-rays. 1996. Nature, T. 384, №. 6604, C. 49-51.
[3] Patolyatov A. D. et al. Refractive X-ray lenses made by the two-photon laser lithography method //Physics of Wave Phenomena. – 2022. – T. 30. – №. 5. – C. 325-329.
[4] Danilkin M. et al. Do the laser-printed 3D-structures withstand the X-ray synchrotron radiation beam? //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2025. – T. 558. – C. 165559.

СД-II-24

Поляризационная спектроскопия рентгеновского поглощения для выполнения фундаментальных исследований современных магнитных материалов

Платунов М.С.
ЦКП "СКИФ", ФИЦ ИК СО РАН, р.п. Кольцово, Россия
msplatunov@gmail.com

Появление современных источников синхротронного излучения дало мощный импульс развитию рентгеновской спектроскопии, что демонстрируется созданием множества новых экспериментальных методов, основанных на использовании поляризационных свойств рентгеновского излучения. Особенно это касается рентгеновского магнитного кругового дихроизма (XMCD), который стал ключевым инструментом в современном магнетизме, позволяя глубже понять микроскопическую природу магнитного состояния вещества с элементной и орбитальной чувствительностью [1].

Показательной иллюстрацией потенциала метода XMCD является исследование ферримагнетика $Co_2FeO_2BO_3$, в котором элементно-чувствительный анализ при помощи XMCD в мягком и жёстком рентгеновском диапазоне позволил установить вклады спиновых и орбитальных магнитных моментов ионов Co^{2+} и Fe^{3+}. Было обнаружено, что высокая коэрцитивность (более 7 Тл при низких температурах) обусловлена как сильным антиферромагнитным взаимодействием между Co и Fe, так и выраженной анизотропией Co^{2+}. Эти результаты продемонстрировали, как за счёт управляемого зарядового упорядочивания и контролируемого распределения катионов по кристаллографическим позициям можно проектировать магнитные материалы без редкоземельных элементов с сильными магнитными свойствами, перспективными для соответствующего применения [2,3]. В дополнение к XMCD, активно развивается метод рентгеновского естественного кругового дихроизма (XNCD), позволяющий визуализировать пространственное распределение хиральных доменов в мультиферроиках. В частности, на монокристалле $SmFe_3(BO_3)_4$ был продемонстрирован метод картирования структурных двойников [4]. Эти результаты показали, что XNCD может использоваться как чувствительный инструмент для изучения доменной структуры, а также механизмов магнитоэлектрической связи в редкоземельных ферроборатах.

В докладе будут приведены дополнительные примеры использования этих методов [5]. Кроме того, будет рассмотрен эффект рентгеновского магнитохирального дихроизма (XMχD) [6], проявляющийся в магнитоэлектрических системах или в хиральных молекулярных магнитах. Кратко будет представлена концепция универсальной исследовательской станции диагностики функциональных магнитных материалов с использованием поляризованного рентгеновского излучения, разрабатываемая в рамках проекта синхротрона СКИФ [7].

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0040).

Литература:

[1] Rogalev A., Wilhelm F. The physics of metals and metallography. – 2015. – Vol. 116. – P. 1285–1336.
[2] Platunov M.S., Platunov A.M. Origin of large coercivity in charge-ordered lanthanide-free magnets // Materialia. – 2025. – Vol. 39. – P. 102316.
[3] Platunov M.S. High-coercivity ferrimagnet $Co_2FeO_2BO_3$: XMCD insights into charge ordering and cation distribution // Inorganics. – 2025. – Vol. 13, No. 1. – P. 24.
[4] Platunov M.S., Gudim I.A., Ovchinnikova E.N., Kozlovskaya K.A., Wilhelm F., Rogalev A., Hen A., Ivanov V.Yu., Mukhin A.A., Dmitrienko V.E. X-ray natural circular dichroism imaging of multiferroic crystals // Crystals. – 2021. – Vol. 11, No. 5. – P. 531(1-14).
[5] Perlepe P., Oyarzabal I., Mailman A., Yquel M., Platunov M., Dovgaliuk Y., Rouzières M., Négrier Ph., Mondieig D., Suturina E.A., Dourges M.-A., Bonhommeau S., Musgrave R.A., Pedersen K.S., Chernyshov D., Wilhelm F., Rogalev A., Mathonière C., Clérac R. Metal-organic magnets with large coercivity and ordering temperatures up to 242°C // Science. – 2020. – Vol. 370, No. 6516. – P. 587–592.
[6] Mitcov D., Platunov M., Buch C.D., Reinholdt A., Dossing A.R., Wilhelm F., Rogalev A., Piligkos S. Hard X-ray magnetochiral dichroism in a paramagnetic molecular 4f complex // Chemical Science. – 2020. – Vol. 11, No. 13. – P. 8306–8311.
[7] Платунов М.С., Зубавичус Я.В., Овчинников С.Г., Золотарев К.В. Концепция универсальной исследовательской станции диагностики функциональных материалов с использованием поляризованного рентгеновского излучения // Технологическая инфраструктура Сибирского кольцевого источника фотонов «СКИФ». В 3 т. Т. 3: Устройства генерации и фронтенды, системы управления и ИТ-обеспечения экспериментальных станций первой очереди; предварительные проекты экспериментальных станций второй очереди. – Новосибирск: ИК СО РАН, 2022. – С. 313–332. – ISBN 978-5-906376-43-5.

СД-II-25

Исследование электронной структуры редкоземельного интерметаллида $TbCo_2Ni_{0,1}$ методом резонансной фотоэмиссионной спектроскопии

Пономарева Е.А.[1], Чумаков Р.Г.[2], Маслова С.А.[1], Герасимов Е.Г.[1,3], Мушников Н.В.[1,3], Кузнецова Т.В.[1,3]

1 – ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

2 – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

3 – Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

kat9107@yandex.ru

Редкоземельные интерметаллиды RCo_2T_x (R – редкоземельный элемент, T – переходный металл) с кристаллической структурой типа $MgCu_2$ (фаза Лавеса C15, пространственная группа $Fd\bar{3}m$) активно исследуются благодаря своим магнитным свойствам и особенностям электронной структуры. Уникальные характеристики позволяют рассматривать их в качестве перспективных функциональных материалов с гигантской магнитострикцией, большим магнитосопротивлением и магнитокалорическим эффектом [1-5]. Наличие магнитных редкоземельных ионов приводит к появлению магнитных моментов в подрешетке кобальта, при этом в зависимости от R меняются как магнитные свойства, так и электронная структура соединения.

Целью данной работы является исследование *d*- и *f*- состояний элементов, а также их влияние на формирование электронной структуры редкоземельного интерметаллида $TbCo_2Ni_{0,1}$. Метод резонансной фотоэмиссионной спектроскопии с использованием синхротронного излучения в качестве источника фотонов позволяет выделить вклады редкоземельного и переходных металлов в валентную зону, в частности исследовать локализацию 4*f*-электронов тербия 3*d*-электронов кобальта и никеля. Измерение фотоэмиссионных спектров проводится на станции НаноФЭС Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований НИЦ «Курчатовский институт». Для определения энергий возбуждения фотоэмиссии проводится регистрация спектров поглощения исследуемых уровней элементов.

В результате анализа фотоэмиссионных спектров получена зависимость формы спектров валентной зоны $TbCo_2Ni_{0,1}$ от энергии фотонов вблизи краев поглощения внутренних уровней тербия, кобальта и никеля. Исследованы процессы прямого и двухступенчатого выхода фотоэлектронов, упругого и неупругого каналов распада этих состояний с испусканием высокоэнергетических электронов за счет внутриатомного кулоновского взаимодействия. Конкуренция упругого и неупругого каналов фотоэмиссии приводит к различным зависимостям спектров фотоэмиссии в нашем случае кобальта и никеля от энергии фотонов. Появление второго переходного металла и его концентрация влияют на интенсивность редкоземельных пиков в валентной полосе, что подтверждает необходимость определения *d-f* взаимодействий в подобных системах.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект №23-72-00067.

Литература:

[1] Gratz E., Markosyan A.S. // J. Phys. Cond. Matter. 2001. V. 13. P. 385-413.
[2] Duc N.H., Kim Anh D.T. // J. Magn. Magn. Mater. 2002. V. 873. P. 243-245.
[3] Мушников Н.В., Гавико В.С., Герасимов Е.Г., Терентьев П.Б., Ткач И.А. // ФММ. 2010. Т. 110. С. 223-231.
[4] Bibekananda Maji, Suresh K.G., Nigam A.K. // J. Magn. Magn. Mater. 2010. V. 322. P. 2415-2418.
[5] Инишев А.А., Герасимов Е.Г., Мушников Н.В., Терентьев П.Б., Гавико В.С. // ФММ. 2018. Т. 11. С. 1113-1120.

СД-II-26

Исследование эволюции наноструктуры СВМПЭ при нагреве методами ШУРР/МУРР

Статник Е.С.[1,2,3], Горшкова Ю.Е.[4], Жеребцов Д.Д.[2], Садыкова Ю.А.[1], Салимон А.И.[1,2,3], Корсунский А.М.[1,2,3]

1 – Сколтех, Москва, Россия

2 – НИТУ МИСИС, Москва

3 – МАИ, Москва, Россия

4 – ОИЯИ, Дубна, Россия

eugene.statnik@skoltech.ru

Сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) — высокоэффективный полимер, востребованный в биомедицине, робототехнике и производстве композитов [1]. Самоармированные композиты на его основе (САК-СВМПЭ), где и матрица, и армирующие волокна состоят из одного полимера, обладают уникальными физико-механическими свойствами за счет переплетения макромолекул на границе раздела [2]. Важным свойством таких материалов является эффект памяти формы (ЭПФ), механизм которого тесно связан с надмолекулярной структурой данного полимера.

В данной работе методами малоуглового (МУРР) и широкоуглового (ШУРР) рентгеновского рассеяния впервые проведено комплексное исследование температурной эволюции наноструктуры самоармированного композита на основе СВМПЭ, полученного методом горячего прессования (170 °C, 25 МПа, 10 мин) однонаправленно уложенных высокоориентированных волокон марки SGX Dyneema® [3]. Эксперимент проводился на станции рентгеновского рассеяния XEUSS 3.0 на расстояниях 50 мм (ШУРР) и 900 мм (МУРР) посредством *in situ* нагрева в диапазоне 23–140 °C с шагом 20 °C с помощью термостолика Linkam HFSX350 +RH. Для учета анизотропии структуры полученные диаграммы рассеяния (Рис. 1) раздельно интегрировались по секторам (±30°) вдоль продольного (ось волокна) и поперечного направлений.

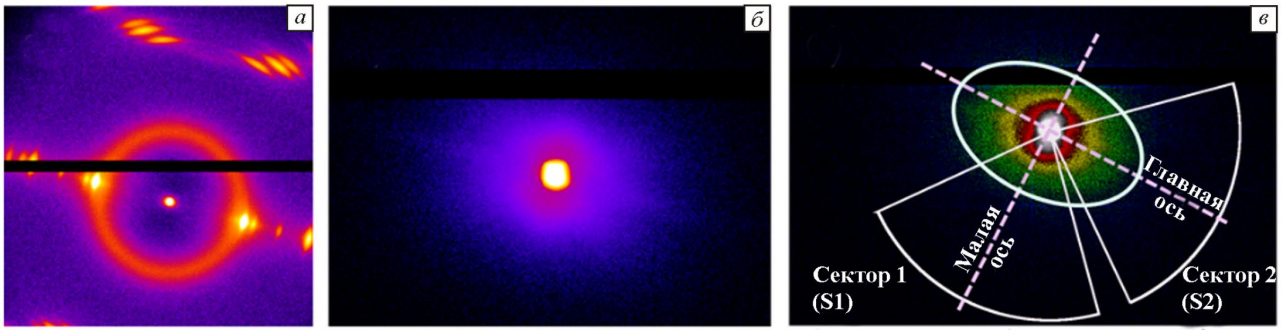


Рис. 1. Пример диаграмм рассеяния: (а) ШУРР, (б) МУРР. (в) Схема секторного интегрирования

Детальный анализ диаграмм МУРР с использованием обобщенной модели Гинье-Порода [6] показал принципиальную разницу в поведении материала вдоль разных направлений. В поперечном направлении радиус инерции вращения и размерный фактор изменялись незначительно — первый возрастал с 3.0 до 3.4 нм в течение всего температурного диапазона. Напротив, вдоль направления ориентации волокон наблюдался скачкообразный рост радиуса

инерции вращения примерно в 1.5 раза (с 3.4 до 5.1 нм) и увеличение размерного фактора на 10 % (с 2.6 до 2.9), начинавшийся с температуры ~80 °C, что соответствует известному температурному порогу активации ЭПФ в СВМПЭ [4,5].

Последующий анализ диаграмм ШУРР и одномерной корреляционной функции подтвердил, что кристаллические домены остаются структурно стабильными — размер кристаллитов и их коэффициент теплового расширения остаются практически постоянными в течение всего процесса нагрева. В то же время коэффициент теплового расширения аморфной фазы оказался на порядок выше и достигал максимальных значений именно вдоль направления ориентации макромолекул.

Таким образом, комбинированный анализ диаграмм ШУРР/МУРР позволил установить, что ЭПФ в САК-СВМПЭ реализуется преимущественно за счет направленной перестройки аморфной фазы вдоль ориентации волокон, в то время как кристаллическая фаза остается стабильной и выполняет роль «якорей», запоминающих исходную форму [6].

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 21–73–20205.

Литература:

[1] Kurtz, S.M. // UHMWPE Handbook, 2009.
[2] Capiati, N.J. and Porter, R.S. // The Concept of One Polymer Composites Modelled with High Density Polyethylene, J. Mater. Sci., 1975, vol. 10(10), pp. 1671–1677.
[3] Zherebtsov, D.D., Chukov, D.I., Torokhov, V., and Statnik, E.S., Manufacturing of Single-Polymer Composite Materials Based on Ultra-High Molecular Weight Polyethylene Fibers by Hot Compaction, J. Mater. Eng. Performance, 2020, vol. 29(3), pp. 1522–1527.
[4] Maksimkin, A.V., Kaloshkin, S.D., Zadorozhnyy, M.Yu., and Tcherdyntsev, V.V., Comparison of Shape Memory Effect in UHMWPE for Bulk and Fiber State, J. Alloys Compd., 2014, vol. 586, pp. S214–S217.
[5] Salimon, A.I., Senatov, F.S., Kalyaev, V., and Korsunsky, A.M., Shape Memory Polymer Blends and Composites for 3D and 4D Printing Applications, in 3D and 4D Printing of Polymer Nanocomposite Materials, Sadasivuni, K.K., Deshmukh, K., and Almaadeed, M.A., Eds., Elsevier, 2020, pp. 161–189.
[6] Статник Е.С., Горшкова Ю.Е., Салимон А.И. и др. // Исследование эволюции наноструктуры при нагреве самоармированного сверхвысокомолекулярного полиэтилена методами широкоуглового и малоуглового рентгеновского рассеяния, Физическая мезомеханика, 28, 1, 2025, с. 22–31.

СД-II-27

Разработка методики определения ориентации затравок для получения крупных монокристаллов системы Li-Na-Mo-O

Сычкова Д.С.[1,2], Серебренникова П.С.[1,2], Громилов С.А.[1,2], Григорьева В.Д.[1,2]
1 – ИНХ им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – НГУ, Новосибирск, Россия
d.sychkova@g.nsu.ru

Для улучшения качества крупных кристаллов при выращивании методом вытягивания из расплава необходимо предварительно определять ориентацию затравок. Обычно для этого применяют оптические методы, метод травления и дифракционные методы. Все они имеют ряд недостатков. Определение ориентации оптическими методами требует использование ограненных кристаллов или имеющих хотя бы одну оптически плоскую поверхность [1]. Недостатком метода травления является подбор оптимальных условий: активность травителя и время травления [2]. К недостаткам широко распространенного метода определения ориентации грани крупного кристалла на порошковых дифрактометрах можно отнести: необходимость использования специализированной гониометрической приставки (или прибора), коллимации первичного пучка, изготовление срезов и невысокая точность.

В работе [3] применялась методика, позволяющая определять ориентацию произвольного среза по положению трех рефлексов на порошковом дифрактометре. Данная методика может быть адаптирована для применения на стандартном монокристальном дифрактометре, оснащенном 2D-детектором. Это сопряжено с двумя проблемами: большим поглощением крупных кристаллов при дифракции рентгеновских лучей на просвет и необходимостью знать точное положение грани относительно первичного пучка. Для решения этих проблем можно регистрировать дифракцию на отражение в больших углах $2\theta_D$. Широкие возможности для этого предоставляет синхротронное излучение.

В данной работе предлагается использование специальной приставки для определения ориентации крупных кристаллов на дифракционных станциях СКИФ. Основными элементами приставки являются: съемный дополнительный коллиматор и держатель образца. Первый позволяет устанавливать гониометрическую головку перпендикулярно первичному пучку (рис. 1а), второй - грань кристалла в идентичное положение (рис. 1б). Далее при проведении ω-сканирования серия полученных 2D-фреймов позволит провести индицирование и, далее, определить точное положение трех рефлексов для расчетов индексов грани.

Предварительные расчеты для станции 1-2 “Структурная диагностика” СКИФ для $\lambda \approx 0.7$ Å, размера пятна излучения на образце 50 мкм, расходимостью на образце μ = 120 мкрад и расстоянием до детектора 500 мм [4], показывают, что оптимальная длина дополнительного коллиматора составит 50 мм. Это позволит получить на детекторе пятно диаметром около 3 пкс. для определения положения дополнительного коллиматора, обеспечивающего пятну максимальную интенсивность.

В качестве тестовых образцов будут использованы затравки для выращивания крупных функциональных кристаллов системы Li-Na-Mo-O. Благодаря наличию люминесцентных

свойств они применяются в качестве базовых элементов сцинтилляционного болометра для регистрации энергии, выделяющейся при безнейтринном двойном бета-распаде [5]. Из-за низкой энергии распада необходимо использовать кристаллы хорошего оптического качества. Определение ориентации кристаллических затравок позволит решить эту задачу. Среди таких фаз в литературе известны $LiNa_5Mo_9O_{30}$ (*Fdd*2) [5] и $Li_{0.1}Na_{5.9}Mo_{11}O_{36}$ (*C*2/*c*) [6].

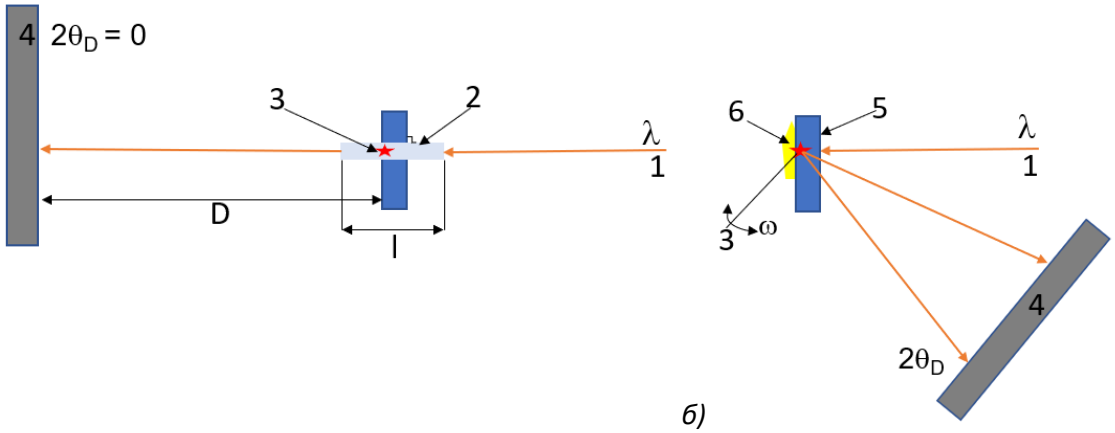


Рис. 1. Схема предлагаемого эксперимента: а) схема установки гониометрической головки перпендикулярно первичному пучку; б) схема определения ориентации кристалла: 1 — пучок синхротронного излучения, 2 — дополнительный коллиматор, 3 — центр гониометра, 4 — детектор, 5 — держатель образца, 6 — исследуемый кристалл.

Благодарности: Авторы благодарят программу «Приоритет-2030» НГУ за поддержку участия в работе молодых исследователей. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 25-73-00328.

Литература:

[1] Грум-Гржимайло С.В. Приборы и методы для оптического исследования кристаллов // Наука 1972. С. 67-83.

[2] Комаровский Н.Ю. и др. Определение ориентации монокристалла с помощью анализа геометрии отпечатка индентора // Международный научно-исследовательский журнал. 2021. №. 4-1 (106). С. 20-25.

[3] Лисойван В.И., Громилов С.А. Определение индексов плоскости среза монокристалла на дифрактометре // Кристаллография. 1988. Т.33. Вып. 5. С. 1274-1275

[4] Винокуров З.С. и др. Концептуальный дизайн станции 1-2 «Структурная диагностика» ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН // Электронный сборник статей. 2022. С. 101

[5] Sukharev V.A. et al. Crystal growth and luminescent properties of $LiNa_5Mo_9O_{30}$ // Journal of Crystal Growth. 2019. V.519. P.35-40.

[6] Inorganic Crystal Structure Database. ICSD [database] // Fashin formation szentrum Karlsruhe. Eggenstein—Leopoldshafen, Germany. 2020. URL: https://icsd.products.fiz-karlsruhe.de/)

СД-II-28

Рентгенофлуоресцентный анализ с использованием синхротронного излучения, методики анализа образцов различной природы

Трунова В.А.[1,2]

1 – Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский национальный государственный исследовательский университет, Новосибирск, Россия

valna-t@mail.ru

Принимая во внимание уникальные особенности синхротронного излучения (СИ) (высокая интенсивность первичного пучка излучения, на много порядков превышающая интенсивность традиционных лабораторных источников излучения, широкий спектральный диапазон и естественная коллимация пучка СИ), разработана методология применения рентгенофлуоресцентного анализа на синхротронном излучении (РФА-СИ) для образцов различной природы.

В ходе выполненной работы [1] получена методология исследования элементного состава образцов биологической и геологической природы неразрушающим методом РФА-СИ. Экспериментально реализован способ нормировки спектров РФА-СИ на площадь пика комптоновского рассеяния, учитывающий непостоянство входной интенсивности СИ вследствие цикличной работы накопительного кольца. Измерены массовые коэффициенты поглощения и рассчитаны коэффициенты ослабления характеристического излучения для учета матричных эффектов в биологических и геологических материалах, что позволило использовать градуировочные образцы разной природы для способа прямого внешнего стандарта.

Для биологических материалов массой от 0,5 до 10 мг показано, что криоконсервация является надежным способом сохранения исходного состава исследуемой пробы. Доказана возможность использования порошковых стандартных образцов в качестве внешнего стандарта при прямом анализе плоскопараллельных цельных фрагментов биотканей.

Проведено систематическое исследование элементного состава биотканей печени, легких и отделов сердечно-сосудистой системы, красного костного мозга в результате чего: с использованием разработанных методик определены концентрации химических элементов (P, S, Cl, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Br, Rb, Sr, Zr, Mo) в тканях и органах с различающимся матричным составом. Установлено, что рубидий может являться маркером сердечно-сосудистой патологии – дилатационной кардиомиопатии. При исследовании пищевого ожирения у экспериментальных животных было установлено, что такие элементы как – V, Cr, Ni, Mn, Br, Rb, Sr, As, Zr, Mo, принимают активное участие в метаболических процессах печени и легких.

В рамках проведения комплекса мероприятий по разработке и аттестации методики выполнения измерений (МВИ) проводилась метрологическая экспертиза используемых СО зарубежного производства совместно и по договору с ФГУП «Уральский научно-исследовательский институт метрологии». 16 международных СО внесены в Государственный

реестр с регистрационным номером для каждого стандарта и допущены ФГУП «Уральским научно- исследовательский институтом метрологии» к применению в Российской Федерации. Нами выполнены измерения каждого стандартного образца (n = 20–30) и определены метрологические характеристики этих измерений. На основании этих данных выполнена аттестация методики измерений – «Методика выполнения измерений массовой доли химических элементов в пробах биотканей методом рентгенофлуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения» (МВИ). Она предназначена для измерения массовой доли химических элементов P, S, Cl, K, Ca, Sc, Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Br, Rb, Sr, Hg, Pb в пробах биотканей на экспериментальной станции рентгенофлуоресцентного анализа в СО РАН «Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера», г. Новосибирск.

Разработанная методика РФА-СИ для сканирования кернов донных отложений позволила определить концентрации элементов (породообразующих, редких и рассеянных); сканирующий анализ с пространственным разрешением 1–0,5 мм позволил осуществить реконструкцию динамики ледников Байкальского региона с временным разрешением «год-сезон» в диапазоне от 100 до 1000 лет.

Благодарности: ЦКП СЦСТИ (ИЯФ СО РАН) – за обеспечение источником синхротронного излучения и станции рентгенофлуоресцентного анализа.

Литература:

[1] Трунова В.А. Рентгенофлуоресцентный анализ с возбуждением синхротронным излучением – методология для исследования специфических объектов : диссертация … доктора химических наук: 02:00:02 / В.А. Трунова ; ИГУ. — Иркутск,2017. — 215 с.

СД-II-29

Определение атомарной и электронной структуры золота в гидротермальных растворах методами XANES спектроскопии

Шамьюнов К.М.[1,2], Тригуб А.Л.[1]
1 – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
2 – МФТИ, Москва, Россия
shamiunov.km@phystech.edu

Серосодержащие соединения, наряду с хлоридами, образуют стабильные водные комплексы с золотом и определяют концентрацию последнего в природных рудообразующих флюидах. Рентгеновская спектроскопия поглощения, включающая спектроскопию поглощения рентгеновского излучения вблизи края поглощения (XANES) и протяженную тонкую структуру спектров поглощения (EXAFS), позволяет определять локальное атомное окружение поглощающего атома, его степень окисления и характер химических связей для установления преобладающих форм нахождения золота и их стабильности в различных геохимических условиях. Кроме того, это один из немногих методов, который позволяет определять структуру молекул в растворах, некристаллизующихся молекул, где невозможно применить стандартные дифракционные методы.

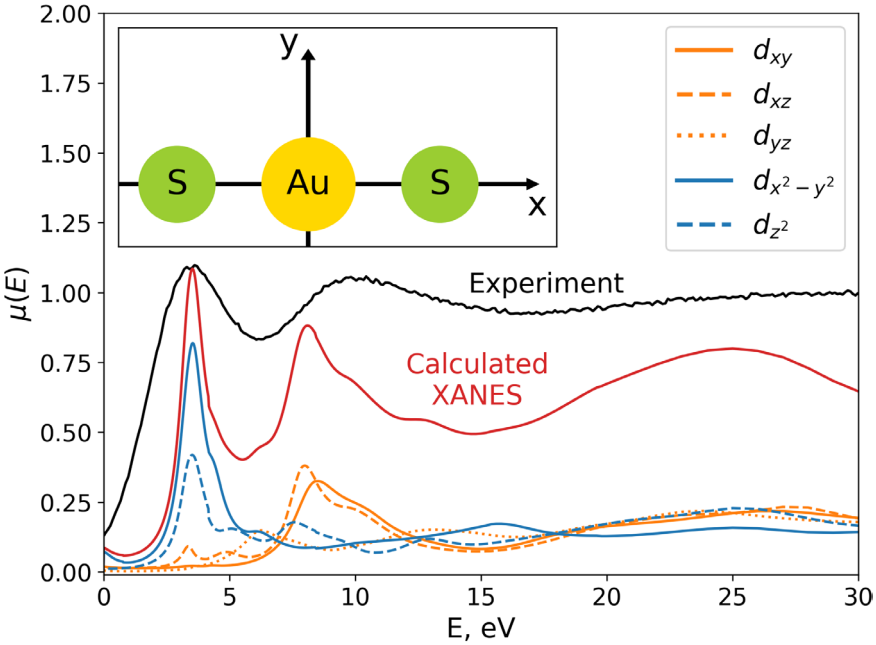


Рис. 1. Экспериментальный XANES спектр L_3 края золота, расчетный XANES спектр и проекции электронных плотностей.

В данной работе изучена локальная атомарная и электронная структура золота в сульфидсодержащих гидротермальных растворах с использованием рентгеновской спектроскопии поглощения. Длина связи Au-S, полученная при анализе EXAFS спектра – 2.29A [1]. Расчеты XANES спектров производились для структур, полученных из расчетов *ab initio* молекулярной динамики, средняя длина связи в которых – 2.40A. Для согласования данных EXAFS и XANES был получен новый набор структур, в которых каждая длина связи Au-S была изменена путем умножения на поправочный коэффициент $\alpha = \frac{d_{EXAFS}}{mean(d_{MD})}$. В ходе работы расчеты XANES спектров, электронных плотностей и их проекций для этих структур

выполнялись в программе FDMNES. На Рис.1 изображены результаты расчетов XANES спектра и проекции электронных плотностей 5d состояний золота. Вклад проекций $d_{x^2-y^2}$ и d_{z^2}, обусловлен $\sigma-$связью , а d_{xy}, d_{xz}, d_{yz} $\pi-$связью . Таким образом, профиль первого пика формируется за счет вклада $\sigma-$связи , а второй пик формируется за счет $\pi-$связи . На основании теоретических расчетов и экспериментальных данных XANES установлена геометрическая структура и зарядовое состояние золота в комплексах $Au(HS)_2^-$, $Au(SO_3)_2^-$, $Au(HS)S_3^-$.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ №25-77-20013.

Литература:

[1] A.L. Trigub, B.R. Tagirov, K.O. Kvashnina, S. Lafuerza, O.N. Filimonova, M.S. Nickolsky, Experimental determination of gold speciation in sulfide-rich hydrothermal fluids under a wide range of redox conditions, Chemical Geology, Volume 471, 2017, Pages 52-64, ISSN 0009-2541, https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2017.09.010.

СД-III-01

Молекулярная динамика как метод построения структурных гипотез для синхротронных исследований

Ведькал А.В.[1], Ивлев А.А.[1,2], Колыбалов Д.С.[1,2], Кадцын Е.Д.[1,2,3]
1 – ЦКП «СКИФ», Кольцово, Новосибирск, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
3 – Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирск, Россия
e.kadtsyn@g.nsu.ru

Проводя структурные исследования, мы чаще всего хотим понять, как устроена изучаемая система на молекулярном уровне, выяснить закономерности пространственного расположения атомов системы. Подобные закономерности, правила, и в целом картину строения исследуемого объекта на микроуровне обычно называют структурной гипотезой или структурной моделью. Структурные, и, в частности, синхротронные исследования используются для проверки, уточнения или пересмотра существующих структурных представлений, а также для получения новых данных, на которых можно построить новые структурные модели.

Однако непосредственно на экспериментальных данных, например, на основании картины рентгеновского рассеяния, строить структурную гипотезу достаточно трудно, в особенности для сложно устроенных многокомпонентных некристаллических систем, в том числе биологических. В настоящее время методы компьютерного моделирования позволяют существенно упростить этот процесс. Особенно здесь следует отметить метод молекулярной динамики, который позволяет получить координаты атомов изучаемой системы в любой момент времени. Молекулярно-динамическая модель сама по себе является структурной моделью, которую в дальнейшем можно валидировать на основе экспериментальных данных. Таким образом, метод молекулярной динамики помогает в структурных экспериментах построить изначальную модель, которая покажет, чего ожидать и как интерпретировать экспериментальные данные, либо помогает на более поздних стадиях объяснить экспериментальные наблюдения.

В данной работе на ряде примеров демонстрируется, как метод молекулярной динамики помогает в интерпретации данных рентгеновского рассеяний. Для смесей вода-диоксан результаты рентгеновского рассеяния на широких углах воспроизводятся в МД модели для разных концентраций. Молекулярная динамика позволяет получить не только общую картину рассеяния, но также разделить рассеяние от каждого из компонентов и продемонстрировать микрорасслаивание при средних концентрациях растворов. Для растворов полистирола в разных растворителях МД моделирование воспроизводит пространственное распределение молекул и объясняет различие в картине малоуглового рентгеновского рассеяния. Для растворов противовирусного препарата тековиримата МД моделирование показывает образование разных комплексов в разных растворителях, причем строение этих комплексов соответствует строению кристаллов полиморфов, осаждающихся из этих растворителей.

Таким образом, МД моделирование позволяет объяснить образование различных полиморфов этого препарата в разных условиях.

МД моделирование в комбинации с ИИ позволяет предсказывать структуру новых белков. На основании этих моделей можно предсказывать кривые малоуглового рассеяния, которые в дальнейшем можно сравнивать с экспериментом. Наконец, МД моделирование позволяет предсказывать структуру белок-лигандных комплексов, которую также можно сравнить с данным рентгеновского рассеяния. На структуру таких комплексов могут влиять условия среды, в частности состав растворителя, и МД моделирование способно показать эти различия.

СД-III-02

Анализ топологии материалов по их трехмерным изображениям, полученным с помощью синхротронного источника излучения

Колупанова М.А., Зубов А.С., Кондратюк Н.Д., Герке К.М.
МФТИ, Физтех, Долгопрудный, Россия
kolupanova.ma@phystech.edu

Синхротронное излучение (СИ) является наиболее перспективным методом в получении высококачественных трехмерных изображений микроструктуры пористых материалов, таких как горные породы, керамика и биологические ткани [1]. Детальные трехмерные реконструкции открывают путь не только к качественному визуальному анализу, но и к количественному расчету методами моделирования физических свойств материала, таких как проницаемость, упругость и капиллярное давление [2,3]. Традиционные методы обработки изображений, включая сегментацию, анализ отдельных пор и гистограмм распределения пор по размерам, в основном сфокусированы на морфологических характеристиках пустотного пространства [4]. Однако для адекватного описания динамических процессов, например, фильтрации и многофазного вытеснении, критически важными становятся именно топологические свойства: связность, наличие тупиковых пор, количество каналов, подходящих к каждой поре и т.д., которые определяют пути потоков и остаточное насыщение флюидов. Морфология описывает форму, в то время как топология описывает, как эти формы соединены между собой.

Для перехода от морфологии к топологии требуются современные математические аппараты. Дискретная теория Морса позволяет упростить сложную структуру, выделив в ней критические точки и построив на их основе скелетон, отражающий топологию объекта [5]. Персистентная гомология, в свою очередь, дает инструмент для количественной оценки топологических инвариантов (числа Бетти), описывающих количество компонент связности, туннелей и полостей на разных масштабах, отделяя значимые особенности от шумовых [6]. Интеграция этих методов с поросетевыми моделями (pore-network models) позволяет создать вычислительно эффективный инструмент для моделирования фильтрации, основанный на реальной топологии порового пространства.

В рамках данного исследования была доработана методика для автоматизированного анализа трехмерных изображений [7]. Обработан массив данных реальных образцов керна из различных коллекторов, сканированных с помощью компьютерной томографии. Для каждого образца был проведен полный топологический анализ. Ключевым результатом работы является предложенный метод векторного представления топологической структуры. На основе персистентных диаграмм и параметров поросетевой модели, извлеченной с помощью дискретной теории Морса, для каждого образца формируется многомерный вектор-дескриптор. Этот дескриптор включает в себя персистентные диаграммы, а также топологические индексы связности пор и горловин. Разработанная методика переводит качественное описание сложной микроструктуры в количественные метрики анализа изображений. Это является важным шагом на пути к созданию методов прогнозирования

свойств материалов на основе (или с учетом) их трехмерной топологии, что особенно актуально для задач нефтегазодобычи, материаловедении, в том числе с использованием ИИ.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Программы Министерства науки и высшего образования №075-03-2025-662 от 17.01.2025.

Литература:

[1] Cnudde V., Boone M. High-resolution X-ray computed tomography in geosciences: A review of the current technology and applications // Earth-Science Reviews. 2013. Vol. 123. P. 1–17.
[2] Balashov, V., Savenkov, E., Khlyupin, A., & Gerke, K. M. (2025). Two-phase regularized phase-field density gradient Navier–Stokes based flow model: Tuning for microfluidic and digital core applications. Journal of Computational Physics, 521, 113554.
[3] Gerke, K. M., Sizonenko, T. O., Karsanina, M. V., Lavrukhin, E. V., Abashkin, V. V., & Korost, D. V. (2020). Improving watershed-based pore-network extraction method using maximum inscribed ball pore-body positioning. Advances in water resources, 140, 103576.
[4] Zubov, A. S., Murygin, D. A., & Gerke, K. M. (2022). Pore-network extraction using discrete Morse theory: Preserving the topology of the pore space. Physical Review E, 106(5), 055304.
[5] Delgado-Friedrichs, O., Robins, V., & Sheppard, A. (2014). Skeletonization and partitioning of digital images using discrete morse theory. IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence, 37(3), 654-666.
[6] Edelsbrunner H., Harer J. Persistent homology—a survey // Contemporary mathematics. 2008. Vol. 453. P. 257–282.
[7] Zubov, A. S., Khlyupin, A. N., Karsanina, M. V., & Gerke, K. M. (2024). In search for representative elementary volume (REV) within heterogeneous materials: A survey of scalar and vector metrics using porous media as an example. Advances in Water Resources, 192, 104762.

СД-III-03

Рентгеновская томография нестационарной внутренней структуры нагруженного образца угля

Киряева Т.А.[1], Купер К.Э.[2], Лихачев А.В.[1,3], Тулиглович Д.М.[1]
1 – Институт горного дела СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия
3 – Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск, Россия
ipm1@iae.nsk.su

Существует ряд гипотез, описывающих процесс выделения метана из пластов угля при его добыче закрытым способом [1, 2]. Согласно одной из них, поддерживаемой авторами представляемой работы, механическое разгружение, происходящее благодаря выработке части породы, приводит к тому, что границы пустот в толще угля приходят в квазипериодическое движение с частотой в несколько Герц, при этом количество выделяющегося метана резко возрастает [2, 3]. Целью работы является проверка этой гипотезы путём наблюдения изменения внутренней структуры нагруженного образца угля при изменении нагрузки. Наиболее адекватным методом такого исследования представляется рентгеновская томография [4, 5], которую предполагается осуществить на установке СКИФ. Пусть за промежуток времени Δt происходят значимые изменения внутренней структуры объекта. Тогда, регистрируя проекционные данные с интервалом Δt, можно реконструировать последовательность её изображений и сделать по ним выводы о характере её движения.

Сложность реализации такого эксперимента на практике состоит том, что для предполагаемых частот движения Δt составляет доли секунды, что сравнимо со временем съёмки проекционных данных τ, необходимых для качественной томографической реконструкции. Такая ситуация приводит к тому, что за время регистрации внутренняя структура заметно меняется, и фактически оказывается, что проекции с разных ракурсов принадлежат разным объектам. Поэтому реконструированное изображение областей, где происходит движение, получается размытым. За время τ образец должен совершить один оборот. При этом скорость его вращения должна обеспечить съёмку с N направлений. Если измерение интенсивности зондирующего излучения производится матрицей $n \times n$ пикселей, то считается, что наилучшее разрешение по томограмме будет достигнуто при $N = n$. В распоряжении научной группы имеется камера с регистрирующей матрицей 1000×1000 пикселей, способная вести съёму 4000 кадров в секунду. Таким образом, если потребовать выполнения указанного условия для оптимального разрешения, то будет получена последовательность изображений с интервалом 0.25 сек. По оценке авторов, при такой скорости съёмки можно с достаточной степенью достоверности обнаружить колебания с частотой не более одного Гц.

Для увеличения разрешения метода по времени нужно повысить скорость вращения объекта. При этом, однако, уменьшится количество направлений зондирования, приходящихся на один оборот, что, в свою очередь, приведёт к снижению пространственного

разрешения томограмм. Чтобы оценить ухудшение качества реконструкции при уменьшении числа проекций были проведены вычислительные эксперименты. Томограммы между собой сравнивались как визуально, так и по ряду количественных критериев. В число последних входят контрастности Вебера и Майкельсона, среднее квадратичное отклонение от тестового изображение, среднее отношение сигнал – шум и другие. По результатам был сделан следующий вывод: сокращение числа проекций до 360 позволяет регистрировать колебания с частотой до трёх Гц. При дальнейшем увеличение скорости вращения образца структуры, имеющие на томограмме размер порядка пяти пикселей и менее, становятся визуально плохо различимыми.

Характеристики метода можно улучшить, применяя к последовательности томограмм фильтрацию Кальмана. Результаты, полученные посредством теоретических оценок и численного моделирования, показали, что при использовании модели гармонического осциллятора с частотой до 10 Гц, и оценивании случайной составляющей, исходя из отношения сигнал – шум на текущей томограмме, можно обнаружить колебания частиц (в том числе, негармонические) с частотой, близкой к частоте осциллятора, если такие колебания в действительности имеют место в образце. В частности, были смоделированы проекционные данные от ансамбля из десяти частиц, совершающих гармонические и квазигармонические колебания с частотой от 4.8 до 5.2 Гц. Частицы имели на проекциях размер 5 – 7 пикселей. На каждый оборот образца приходилось 360 ракурсов наблюдения. При быстродействии камеры 4000 кадров в секунду это соответствует последовательности томограмм с интервалом 0.09 сек. Использование фильтра Кальмана с моделью гармонического осциллятора с частотой 5 Гц позволило визуально обнаружить все частицы.

Благодарности: Работа выполнена в рамках проекта НИР (номер гос. регистрации 124020700085-5).

Литература:

[1] Дырдин В.В., Ким Т.Л., Фофанов А.А., Плотников Е.А., Воронкина Н.М. Газовыделение при механодеструкции угля // Известия высших учебных заведений. Горный журнал. 2019. № 5. С. 44 – 53. DOI: 10.21440/0536-1028-2019-5-44-53.
[2] Качурин Н.М., Качурин А.Н., Киряева Т.А., Ганин М.П. Динамика выделения метана из разрабатываемого угольного пласта в подготовительную выработку // Известия Тульского государственного университета. Науки о Земле. 2024. № 4. С. 597 – 605.
[3] Опарин В.Н., Киряева Т.А. Геомеханические и физико-химические процессы, определяющие выбросо- и пожароопасность угольных пластов Кузбасса // Вестник Инженерной школы Дальневосточного федерального университета. 2014. № 3 (20). С. 69 – 87.
[4] Ворошилов Я.С., Коков А.Н. Исследования фрактальной структуры угля методами компьютерной томографии // Вестник научного центра по безопасности работ в угольной промышленности. 2014. № 2. С. 49 – 57.
[5] Лихачев А.В., Киряева Т. А. Моделирование задачи оценки размеров полостей в образцах угля методом рентгеновской томографии // Известия ТулГУ. Науки о Земле. 2025. Вып. 3. – С. 60–69.

СД-III-04

Методология явного учета тепловых колебаний жестких атомных фрагментов при моделировании спектров поглощения рентгеновского излучения

Савин С.С., Тригуб А.Л.
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
bellaccqua@gmail.com

Классический анализ рентгеновских спектров поглощения в EXAFS-области методом наименьших квадратов может быть нетривиальным из-за необходимости учета теплового движения атомов для большого количества различных координационных оболочек, что приводит к недоопределенности задачи и невозможности ее решения.

В работе освящена разработка методологии моделирования спектров EXAFS на основе явного учета теплового движения атомов стабильных групп, произведена апробация метода на примере уранил-карбонатных комплексов (рисунок 1) и оптимизация расстояния U-CO_3. Учет теплового движения атомов карбонат-аниона произведен для кальцита в ПО CP2K [1].

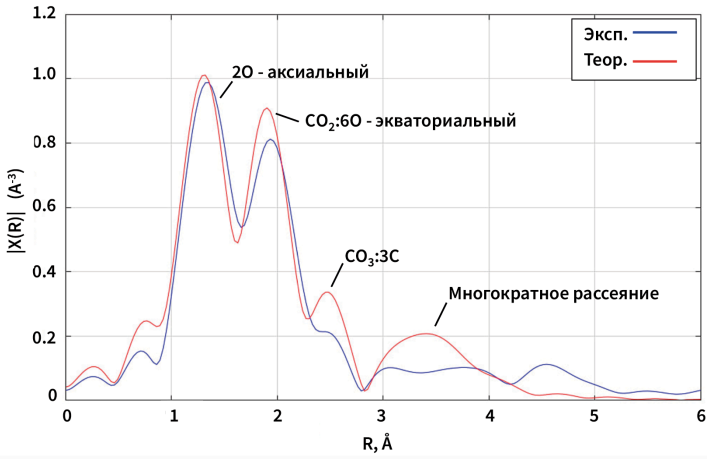


Рис. 1. Теоретический и экспериментальный EXAFS-спектры $UO_2(CO_3)_3$

Сравнения теоретического и экспериментального EXAFS-спектров уранил-карбонатного комплекса показывают высокий уровень согласованности вкладов рассеяния и межатомных расстояний. Методология также показывает свою эффективность в снижении количества неизвестных параметров при подгонке EXAFS-спектров: анализ данной структуры методом наименьших квадратов требует определения как минимум 8-и неизвестных переменных, с применением разрабатываемого метода число степеней свободы снижается до 3-х.

Литература:

[1] Kühne T.D., Iannuzzi M., Ben M.D. // J. Chem. Phys. 2020. №152

СД-III-05

GPU ускорение подгонки EXAFS спектра эволюционным алгоритмом

Тригуб А.Л.
НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
Trigub_AL@nrcki.ru

Метод дальней тонко структуры рентгеновского спектра поглощения (EXAFS) уже давно зарекомендовал себя как структурный метод, позволяющий определять локальной атомарную структуру неупорядоченных сред или определять искажения ближнего порядка в кристаллических средах около поглощающего атома в зависимости от физического или химического воздействия. Стандартный анализ спектров EXAFS, основанный на варьировании параметров координационных сфер во многих случаях затруднителен или является мало информативным. Альтернативой этому подходу является эволюционный алгоритм, в котором структурная модель задана не в виде независимых координационных сфер, а как набор декартовых координат. В результате оптимизации получают набор декартовых координат, что позволяет получить более полную структурную информацию, в сравнении с посферной подгонкой спектра. Одной из проблем данного подхода это необходимость включения в расчет минимум несколько сотен поглощающих атомов, для построение ансамбля атомов, имитирующих тепловые колебания. В данной работе представлены возможности программного обеспечения созданного при помощи языка программирования Python с использование библиотеки JAX, которая позволяет легко адаптировать вычисления на GPU. На Рис.1 показан график затрачиваемого времени на 1 итерацию для программы EvAX [1] и созданного ПО без использования GPU и с GPU. Видно, что использование GPU позволяет ускорить вычисление примерно в 200 раз.

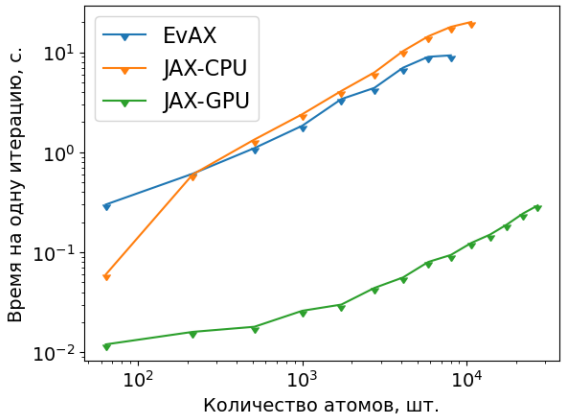


Рис. 1. Зависимость времени, затрачиваемое на 1 итерацию, от количества атомов в расчете.

Литература:

[1] J. Timoshenko, A. Kuzmin, J. Purans, J. Phys. // Condens. Matter. 2014. T. 26. C. 055401-055416.

СД-IV-01

In situ XAS исследование активных центров катализаторов на основе оксидов молибдена, нанесенных на TiO_2, в реакции селективного окисления метанола

Айдаков Е.Е.[1,2,3], Сараев А.А.[1], Куренкова А.Ю.[1], Яшник С.А.[2], Каичев В.В.[2]
1 – ЦКП «СКИФ», Кольцово, Россия
2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
3– Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
e.aydakov@catalysis.ru

Катализаторы на основе оксидов молибдена, нанесённых на диоксид титана, являются одними из наиболее перспективных систем для процессов селективного окисления спиртов, в частности, метанола. Несмотря на широкое применение таких материалов, природа их активных центров и механизм окисления в условиях реакции остаются предметом дискуссий. В настоящей работе проведено исследование MoO_3/TiO_2 катализаторов методом *in situ* рентгеновской спектроскопии поглощения (XAS), включая анализ ближней (XANES) и дальней (EXAFS) областей спектров. Такой подход позволяет проследить изменения в координационном окружении молибдена и его степень окисления в ходе каталитического процесса.

Изучение структуры катализаторов с различным содержанием MoO_3 показало, что при низких концентрациях молибдена формируются в основном высокодисперсные наночастицы MoO_3, тогда как при увеличении содержания молибдена наблюдается образование кристаллических фаз MoO_3.

Методом *in situ* XAS в условиях протекания реакции селективного окисления метанола показано, что молибденовые центры играют ключевую роль в механизме превращения метанола в формальдегид. Полученные данные позволяют напрямую наблюдать структурно-электронные изменения в активных центрах MoO_3/TiO_2 катализаторов в реакционных условиях. Катализаторы, содержащие высокодисперсные MoO_3 частицы, демонстрируют более выраженные обратимые изменения в координации и, соответственно, более высокую селективность к формальдегиду.

Таким образом, использование *in situ* XAS открывает новые перспективы в понимании механизмов селективного окисления спиртов.

Благодарности: Работа была выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0042).

СД-IV-02

Спектроскопические исследования рентгеноаморфных соединений молибдена

Акимов Ал.С.[1], Коголев Д.А.[2], Акимов А.С.[1]
1 – Институт химии нефти СО РАН, Томск, Россия
2 – Национальный исследовательский Томской политехнический университет, Томск, Россия
akimov149@yandex.ru

Переходные металлы, в частности, молибден благодаря строению атома, имеют довольно обширную химию полиоксоанионов [1]. Полиоксомолибдаты и их частный случай молибденовые сини, как класс соединений, известны достаточно давно, над исследованием их структуры, состава и физико-химических свойств (особенно в растворах) продолжают работать научные группы из разных стран мира. Интерес к полиоксомолибдатным соединениям связан с их уникальным строением, что в свою очередь делает их перспективными соединениями в ряде приложений: носители для адресной доставки лекарств, создание сенсорных материалов, катализаторы и их предшественники. Особенность структуры полиоксомолибдатных соединений приводит к тому, что для анализа их структуры требуется применение сложных физико-химических методов, таких, как например сканирующая туннельная микроскопия, ЯМР спектроскопия на различных ядрах и т.д [2]. Из-за рентгеноаморфности исследование молибденовых синей традиционными рентгеновскими методами (например, методом порошковой рентгеновской дифракции) практически невозможно. Возможным решением вышеотмеченной проблемы является использование методов рентгеновской спектроскопии поглощения (EXAFS и XANES спектроскопии). Методы EXAFS и XANES спектроскопии могут дать информацию о фазовом составе, локальной структуре и валентном состоянии молибдена в составе полиоксомолибдатных соединений. Но вместе с тем использование вышеприведенных методов потенциально несет в себе ряд проблем. Например, может произойти сдвиг края поглощения молибдена из-за наличия нестехиометрических степеней окисления молибдена в составе молибденовых синей, что свою очередь затруднить определение содержание «восстановленных» форм в синях.

Таким образом подбор методов исследования структуры полиоксомолибдатных соединений все еще является актуальной задачей.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 121031200182-5.

Литература:

[1] A. Muller, C. Serain, Acc. Chem. Res. 33 (2000) 2-10.
[2] A. Müller, S. Roy S, Coord Chem Rev. 245 (2003) 153-166.
[3] M.D. Bazhenova, N.N. Gavrilova, V.V. Nazarov, Colloid J. 77 (2015) 3-8.

СД-IV-03

Пленочные алмазные композиты, демонстрирующие люминесценцию эрбия

Александров А.А., Седов В.С., Мартьянов А.К., Тяжелов И.А., Ясыркина Д.С., Захарова А.С., Ширманкин А.В., Воронов В.В., Кузнецов С.В.
Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия
alexandrov1996@yandex.ru

Пленочные алмазные люминесцентные композиты на основе поликристаллического алмаза с внедренными наночастицами фторидов имеют широкий спектр применений в фотонике [1]. Особый интерес к данным материалам обусловлен синергетической совокупностью рекордных характеристик алмаза и люминесценцией редкоземельных элементов.

В литературе представлено ограниченное количество публикаций по успешному внедрению различных люминесцентных наночастиц, причем спектр используемых редкоземельных элементов остается ограниченным (Eu и Ce). Целью данной работы являлся синтез и исследование физико-химических и люминесцентных характеристик пленочных алмазных композитов при внедрении частиц (SrF_2 и $NaGdF_4$), легированных эрбием.

Частицы SrF_2:Er и $NaGdF_4$:Er были получены методами осаждения из водных растворов и в расплавах нитратов, соответственно. Методика изготовления алмазных композитов в условиях роста алмаза посредством метода осаждения из паровой фазы (CVD) подробно описана в работе [1].

В результате синтеза частиц были получены концентрационные серии однофазных твердых растворов $Sr_{1-x}Er_xF_{2+x}$ и $NaGd_{1-x}Er_xF_4$, для которых были определены концентрации эрбия, демонстрирующие наибольший люминесцентный отклик. Определенные составы были внедрены в поликристаллический алмаз с образованием композитного материала. Сравнение люминесцентных характеристик исходных частиц с люминесцентным откликом композитов позволило выявить характеристические изменения, заключающие в изменении количества полос люминесценции эрбия и их полуширины.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00401-П, https://rscf.ru/project/22-13-00401/.

Литература:

[1] Sedov V., Kuznetsov S., Martyanov A., Ralchenko V. // *Functional Diamond*. 2022. **2:1**. 53

СД-IV-04

Исследование пределов растворимости меди в кубическом триалюминиде титана посредством диффузионной пары Cu-$TiAl_3$

Александрова Н.С.[1,2], Пруцков Г.В.[3], Лазуренко Д.В.[1,2]
1 – Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
2 – Центр Коллективного пользования «Сибирский Кольцевой Источник Фотонов», Кольцово, Россия
3 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
aleksandrovanatalie99@gmail.com

Триалюминид титана является перспективным материалом для аэрокосмической и авиационной отраслей промышленности в связи с его низкой плотностью и отличными высокотемпературными свойствами [1]. Однако потенциал данного соединения ограничен низкой трещиностойкостью, составляющей 2 МПа·$м^{1/2}$ [2]. Улучшить данный показатель возможно путем трансформации тетрагональной $D0_{22}$ решетки $TiAl_3$ в более пластичную кубическую $L1_2$, что осуществляется путем создания сплавов $Ti(Al_{1-x}Me_x)_3$, где Me – переходные металлы, такие как Cr, Mn, Fe, Co, Ni и Cu [3]. Уровень трещиностойкости таких сплавов может достигать ~4-5 МПа·$м^{1/2}$ [4]. Однако формирование однофазной $L1_2$ структуры в тройных системах Ti-Al-Me представляет собой сложную задачу по причине узких областей гомогенности $L1_2$-фазы [5]. Любые незначительные отклонения в соотношении элементов неизбежно приведут к выделению дополнительных фаз, присутствие которых зачастую нивелирует эффект повышения пластичности за счет стабилизации кубической фазы [5, 6]. Кроме того, данные по областям гомогенности $L1_2$-фазы в литературных источниках порой противоречивы или вовсе отсутствуют [5, 7].

Для уточнения областей гомогенности $L1_2$-фазы в тройных системах Ti-Al-Me может быть использован метод совместного спекания элементных заготовок и оценка химического состава диффузионного слоя со структурой $L1_2$. В данной работе была изучена диффузионная пара Cu-$TiAl_3$, сформированная методом электроискрового спекания с последующим отжигом в течение 100 часов при 800 °C. Для подтверждения образования слоя с $L1_2$ структурой, стабилизированной медью, осуществлялся эксперимент по синхротронной рентгеновской дифракции на станции «Микрофокус» (К2.2) «Курчатовского источника синхротронного излучения» (КИСИ). Съемка картин дифракции реализовывалась последовательным сканированием зоны диффузионных слоев микропучком с длиной волны 1,24 Å в режиме на отражение. Дифракционные данные представлены в виде карты (Рис. 1), которая позволяет проследить изменение фазового состава диффузионной зоны по ее толщине. Результаты анализа картин дифракции свидетельствуют о формировании в диффузионной зоне слоя $L1_2$-$Ti(Al_{1-x}Cu_x)_3$.

Пределы растворимости Cu в $Ti(Al_{1-x}Cu_x)_3$ исследовали последовательным точечным сканированием слоя от границы с $TiCu_2Al$ до границы с $TiAl_3$ при помощи растрового электронного микроскопа Carl Zeiss EVO50 XVP, оснащенного энергодисперсионным спектрометром X-Act. Установлено (Табл. 1), что содержание Cu в слое находится в интервале ~9-20 ат. % при содержании Ti ~25,5 ат. %. Полученные результаты растворимости меди в

решетке $L1_2$ хорошо согласуются с тройной диаграммой состояния Ti-Al-Cu при 800 °C [8]. Однако, согласно диаграмме, содержание титана для получения однофазной $L1_2$ структуры должно быть на ~0,5 ат. % меньше полученного в данной работе экспериментального значения.

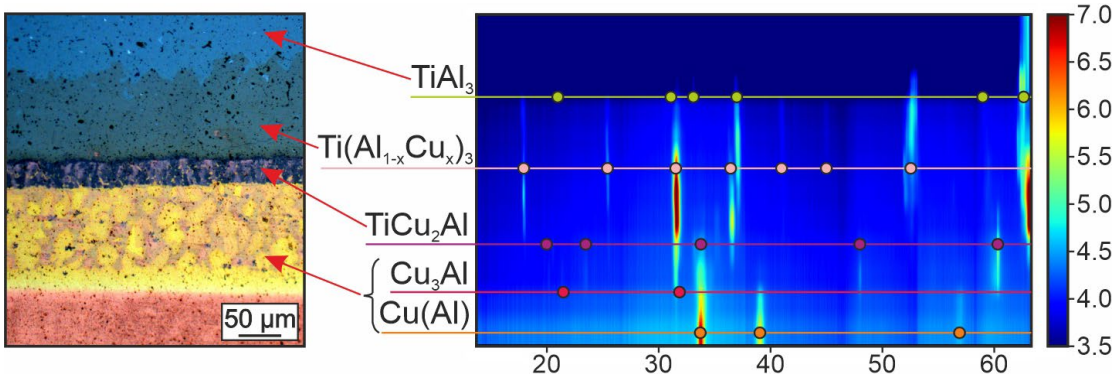


Рис. 1. Карта фазового состава диффузионного слоя, сформированного при взаимодействии Cu и $TiAl_3$, построенная на основе картин дифракции, и соответствующие им слои на металлографическом снимке

Таблица 1. Элементный состав $L1_2$-фазы по толщине слоя, ат. %

Элемент	Измерение (1 – у границы с $TiCu_2Al$, 8 – у границы с $TiAl_3$)							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Ti	25,62	25,72	25,42	25,50	25,20	25,76	25,62	25,64
Al	54,23	57,43	59,26	61,44	62,39	62,76	63,94	65,39
Cu	20,15	16,85	15,32	13,06	12,40	11,62	10,45	8,97

Таким образом, можно заключить, что создание диффузионных пар типа Me-$TiAl_3$ является эффективным методом для исследования пределов растворимости стабилизирующего элемента в $L1_2$ структуре. При этом дифракция рентгеновского синхротронного излучения позволят точно установить фазовый состав тонких слоев.

Благодарности: Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания FSUN-2024-0005 «Структурные преобразования в тонких поверхностных слоях металлических сплавов при экстремальном тепловом и деформационном воздействиях».
Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Структура, механические и физические свойства материалов», НГТУ.
Эксперименты по синхротронной рентгеновской дифракции были проведены в НИЦ «Курчатовский институт».

Литература:

[1] Sauthoff G. // John Wiley & Sons, 2008.
[2] Lazurenko D. V., Lozanov V. V., Stark A., Pyczak F., Ruktuev A. A., Emurlaev K. I., Song L., Bataev I. A., Ivanov I. V., Ogneva T. S., Bataev A. A. // Journal of Alloys and Compounds. 2021. Vol. 875. Art. 160004.
[3] Stoloff N. S., Sikka V. K. // Springer Science & Business Media, Berlin/Heidelberg, Germany, 2012.
[4] Varin R. A., Wexler D., Calka A., Zbroniec L. // Intermetallics. 1998. Vol. 6. P. 547-557.
[5] George E. P., Pope D. P., Fu C. L., Schneibel J. H. // ISIJ international. 1991. Vol. 31. P. 1063-1075.
[6] Wu Z. L., Pope D. P., Vitek V. // Metallurgical and Materials Transactions A. 1995. Vol. 26 P. 521-524.
[7] Kumar K. S. // International Materials Reviews. 1990. Vol. 35. P. 293-328.
[8] https://materials.springer.com/msi/phase-diagram/docs/sm_msi_r_10_016867_02_full_LnkDia4

СД-IV-05

Характеризация продуктов восстановления $^{99}Tc_2(CO)_{10}$

Бабитова Е.С.[1,2], Бречалов А.А.[1,2], Серебрянских Р.А.[2], Сахоненкова А.П.[2], Мирославов А.Е.[1,2]
1 – Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
2 – АО «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина», Санкт-Петербург, Россия
st064214@student.spbu.ru

На сегодняшний день карбонильные комплексы технеция в отрицательных степенях окисления являются наименее изученными среди аналогичных соединений металлов VII группы, получаемых восстановлением соответствующих $M_2(CO)_{10}$ (M=Mn, Re). Так, $[^{99}Tc(CO)_5]^-$ до сих пор не выделен в чистом виде и практически не охарактеризован, а о $[^{99}Tc(CO)_4]^{3-}$ вовсе не известно в литературе, в то время как аналогичные соединения марганца и рения описаны [1, 2]. Все это затрудняет установление связи «строение-свойства» для карбонильных соединений металлов VII группы. Целью данной работы является характеризация продуктов восстановления $^{99}Tc_2(CO)_{10}$ анион радикалом антрацена (Na[anthr]).

Установлено, что при восстановлении $^{99}Tc_2(CO)_{10}$ 5-кратным избытком Na[anthr] в ТГФ в качестве единственного продукта образуется $Na[^{99}Tc(CO)_5]$. ИК $Na[^{99}Tc(CO)_5]$ (ν(CO), $см^{-1}$, ТГФ): 1910, 1862, данные из литературы: ИК $Na[^{99}Tc(CO)_5]$ (ν(CO), $см^{-1}$, ТГФ): 1910, 1862 [1]. ^{99}Tc-ЯМР $Na[^{99}Tc(CO)_5]$ (C_6D_6/ТГФ): -2605 м.д. В результате восстановления $^{99}Tc_2(CO)_{10}$ 20-кратным избытком Na[anthr] в ТГФ образуется нерастворимый коричневый пирофорный осадок. Похожими свойствами обладают комплексы $[M(CO)_4]^{3-}$ (M=Mn, Re), представляющие собой пироформные нерастворимые в ТГФ соединения, обладающие цветом от желтого до коричневого [2]. При анализе протяженной тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения (EXAFS) коричневого осадка удалось установить, что ближайшее окружение технеция-99 в полученном соединении является $[^{99}Tc(CO)_4]$ (рис. 1). Сравнение его краевой тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (XANES) со спектрами $^{99}Tc_2(CO)_{10}$ и $^{99}TcH(CO)_5$ демонстрирует значительное отличие эффективного заряда на атоме технеция-99.

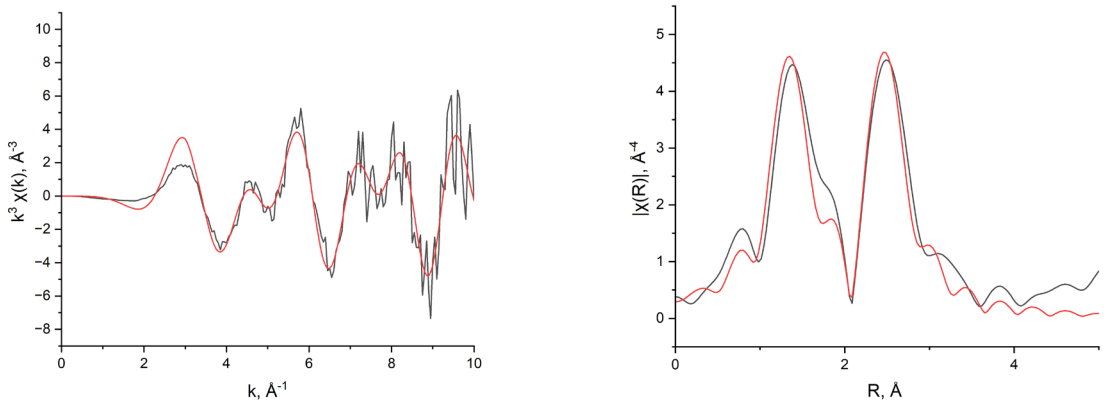


Рис. 1. Экспериментальные (черный) и модельные (красный) EXAFS-спектры продукта восстановления $^{99}Tc_2(CO)_{10}$ и их Фурье-преобразования

Таким образом, на основании физическо-химических свойств полученного соединения и данных рентгеновской спектроскопии поглощения модно предположить образование ранее неизвестного $[Tc(CO)_4]^{3-}$.

Литература:

[1] Hileman, J. C., Huggins, D. K., Kaesz, H. D. *Journal of Inorganic Chemistry*, 1962, 1, 933-938.
[2] Warnock, G. F., Moodie, L. C., & Ellis, J. E. *Journal of the American Chemical Society*, 1989, 111(6), 2131-2141.

СД-IV-06

Электронная структура и магнитные свойства $Ti_{1-x}Cr_x(Se_{0.8}S_{0.2})_2$

Беляев Д.В.[1], Титов А.А.[1], Радзивончик Д.И.[1], Патраков Е.И.[1], Титова С.Г.[2], Чумаков Р.Г.[3], Титов А.Н.[1], Королев А.В.[1], Кузнецова Т.В.[1]

1 – Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

2 – Институт металлургии им. академика Н.А. Ватолина УрО РАН, Екатеринбург, Россия

3 – НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

danil.belyaev08@gmail.com

Дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) имеют обобщенную формулу MX_2 (M = Ti, V, Zr, Nb, Mo, Pd, Hf, Ta, W, Ir, Pt и X = S, Se, Te) и являются слоистыми соединениями. Внутри слоя атомы связаны ковалентно-ионными связями, а между слоями — Ван-дер-Ваальсовыми связями. Эти материалы вызывают большой научный интерес благодаря исключительным свойствам как в объемных, так и в низкоразмерных формах [1,2]. Благодаря схожей кристаллической структуре ДПМ возможно создание твердых растворов на их основе [3,4]. Одной из хорошо изученных систем является твердый раствор $TiSe_2$-TiS_2 [4]. Было показано, что замещение Se на S ($TiSe_{1.6}S_{0.4}$) и S на Se ($TiSe_{0.4}S_{1.6}$) приводит к снижению ЭДС электрохимических ячеек до 0.5 эВ. Эти изменения связаны с увеличением энергии Ферми, которое может быть вызвано Лапласовым давлением (Se^{2-} и S^{2-} имеют разные ионные радиусы) и демонстрируют донорную природу таких систем. Таким образом, возможно осуществить замещение Ti^{4+} на Cr^{3+} без интеркаляции избыточного металла в межслоевое пространство [5].

В данной работе мы синтезировали поликристаллические образцы (x = 0,05, 0,1, 0,15, 0,2, 0,25, 0,3, 0,35, 0,4) методом твердофазных реакций. Кристаллическая структура и фазовая чистота были исследованы методом порошковой рентгеновской дифракции и сканирующей электронной микроскопии. Электронная структура материалов была изучена методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и спектроскопии рентгеновского поглощения с использованием синхротронного излучения. Было показано присутствие ионов Cr^{3+}, Ti^{4+}, Se^{2-} и S^{2-}. На рисунке 1 изображены фотоэлектронные спектры остовных уровней для $Ti_{0.95}Cr_{0.05}(Se_{0.8}S_{0.2})_2$. В спектрах РФЭС остовного уровня Cr 2p наблюдаются 4 пика. Расщепление пика Cr $2p_{3/2}$ составляет около 1 эВ (575,1 и 574,1 эВ) и связано с сильным обменным магнитным взаимодействием между дыркой на уровне $2p_{3/2}$ Cr и электроном на уровне 3d.

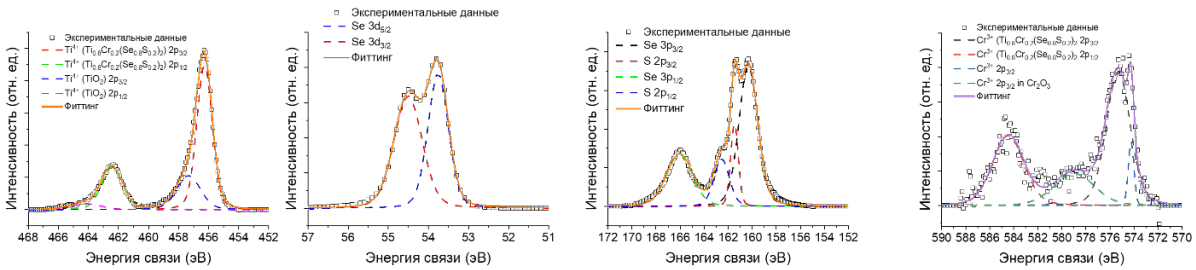


Рис. 1. РФЭС спектры остовных уровней для поликристалла $Ti_{0.95}Cr_{0.05}(Se_{0.8}S_{0.2})_2$.

На рисунке 2(а) показана магнитная восприимчивость (χ) поликристаллических образцов $Ti_{1-x}Cr_x(Se_{0.8}S_{0.2})_2$ Можно отметить, что χ увеличивается с понижением температуры для всех

образцов. На вставке показан рост χ с увеличением концентрации Cr при фиксированной температуре, что указывает на постоянство магнитного момента атомов Cr. Выявление квадрата эффективного момента атомов хрома было выполнено путем фиттинга высокотемпературной области обратной магнитной восприимчивости законом Кюри-Вейса $\chi = C/(T - \Theta)$. Квадрат эффективного магнитного момента на атом Cr близок к 15 μ_B^2, что указывает на присутствие Cr в степени окисления 3+ и не демонстрирует существенных изменений с ростом концентрации. Однако, Θ уменьшается с увеличением концентрации Cr. Кривые ZFC для всех исследованных соединений представлены на рисунке 2(б). Так, с ростом концентрации Cr температура перехода в состояние спинового стекла увеличивается практически линейно. При этом температуры перехода в состояние спинового стекла отличаются от полученных для чистого $TiSe_2$, легированного Cr, почти в два раза [6], что может быть связано с внесением атомов S в систему.

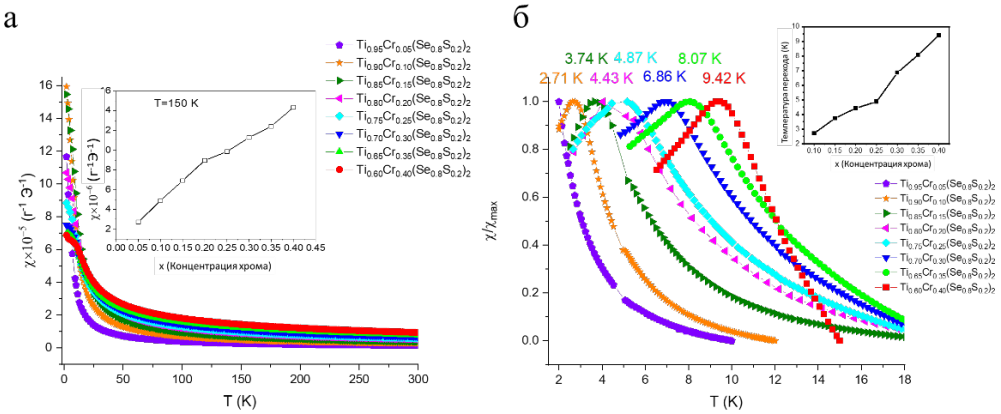


Рис. 2. Зависимость магнитной восприимчивости от температуры (а) и кривые ZFC (б) для поликристаллов $Ti_{1-x}Cr_x(Se_{0.8}S_{0.2})_2$

Благодарности: Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-72-00067.

Литература:

[1] J. Yu, C.-H. Lee, D. Bouilly, M. Han, P. Kim, M.L. Steigerwald, X. Roy, C. Nuckolls, Patterning Superatom Dopants on Transition Metal Dichalcogenides, Nano Lett 16 (2016) 3385–3389.
[2] S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O. V. Yazyev, A. Kis, 2D transition metal dichalcogenides, Nat Rev Mater 2 (2017) 17033
[3] L. Wang, Z. Sofer, J. Luxa, M. Pumera, $Mo_xW_{1-x}S_2$ Solid Solutions as 3D Electrodes for Hydrogen Evolution Reaction, Adv Mater Interfaces 2 (2015).
[4] A.N. Titov, A.S. Shkvarin, A.I. Merentsov, O. V. Bushkova, E.A. Suslov, A.A. Titov, J. Avila, M.C. Asensio, N. V. Kazantseva, M.S. Postnikov, Janus Layers in the $TiSe_2$ –TiS_2 System, Chemistry of Materials 33 (2021) 8915–8925.
[5] A.N. Titov, A.I. Merentsov, V.N. Neverov, Structure and properties of $Ti_{1-x}Cr_xSe_2$ substitutional solid solutions, Physics of the Solid State 48 (2006) 1472–1476.
[6] H. Luo, J.W. Krizan, E.M. Seibel, W. Xie, G.S. Sahasrabudhe, S.L. Bergman, B.F. Phelan, J. Tao, Z. Wang, J. Zhang, R.J. Cava, Cr-Doped $TiSe_2$ – A Layered Dichalcogenide Spin Glass, Chemistry of Materials 27 (2015) 6810–6817.

СД-IV-07

Анализ изменения структуры катализатора Rh/Al_2O_3 в ходе реакции перегруппировки оксим-амид методом EXAFS-спектроскопии

Бердюгин С.Н.[1], Николаев В.А.[2], Асанова Т.И.[1]
1 – ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – НГУ, Новосибирск, Россия
berdyugin@niic.nsc.ru

Катализаторы перегруппировки оксим-амид на основе родия деградируют при повторном использовании, что снижает конверсию бензальдоксима и увеличивает выход побочных продуктов. Для изучения изменений активной формы катализатор $Ca_3[Rh(OH)_6]_2/\gamma\text{-}Al_2O_3$ (2 масс. % Rh) после проведения реакции перегруппировки в течение 14 часов (120°C, 25 мл H_2O, 2 мол. % Rh) был исследован методом EXAFS-спектроскопии.

Спектры Rh K-края (23220 эВ) были зарегистрированы на канале 10C ускорительной лаборатории Pohang (энергия пучка 3,0 ГэВ, ток 300-400 мА). Анализ показал восстановление родия (появление связей Rh-Rh) и его связывание с субстратом (связи Rh-C, Rh-N) (Рис.1). Однако точно установить структуру образовавшихся форм родия не удалось из-за сложности системы и отсутствия эталонных монокристаллических данных.

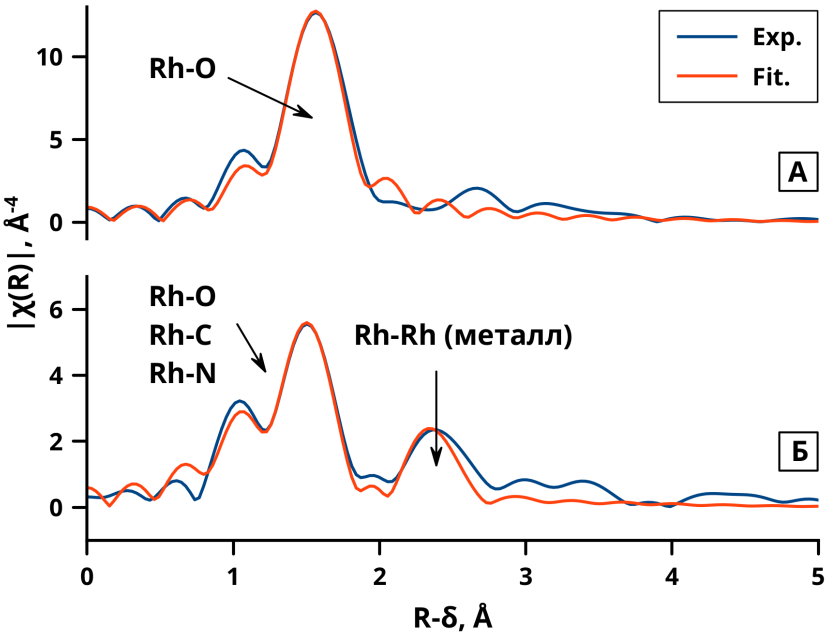


Рисунок 1. Фурье-преобразование EXAFS Rh K-края поглощения, $k^3\chi(k)$, катализаторов ***$Ca_3[Rh(OH)_6]_2/\gamma\text{-}Al_2O_3$ (2 масс. % Rh) до (А) и*** *после 14 часов реакции (Б) (синие кривые) и результаты подгонки (красные кривые).*

СД-IV-08

РФЭС анализ термически и магнетронно осажденных пленок TiOx

Валеев Р.Г., Бельтюков А.Н., Картапова Т.С.
Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
rishatvaleev@udman.ru

Большой интерес в различных приложениях (например, в качестве инжекционных слоев светоизлучающих устройств, элементов энергонезависимой памяти - мемристорах и пр.) представляют пленки оксидов металлов (например, титана, ванадия, никеля) нестехиометрического состава и толщиной от единиц до нескольких десятков нанометров.

В случае мемристоров, предполагаемыми рабочими механизмами являются два: миграция ионизированных атомов кислорода через кристаллическую решетку оксидов через кислородные вакансии [1] и механизм формирования проводящего филамента электрохимической металлизацией химического элемента металлического контакта (например, серебра) через слой оксида с последующим управлением его проводимостью [2, 3]. При этом при снятии внешнего поля такое состояние сохраняется. Подача обратного потенциала возвращает ионы кислорода в первоначальные положения. Таким образом, происходит "переключение" из высокорезистивного в низкорезистивное состояние.

Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) в настоящее время является одним из самых популярных для анализа электронного строения и химического состава материалов и веществ. Имеющийся с ЦКП «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН спектрометр Specs был оснащен системой напыления с электронно-лучевым нагревом, позволяющим осаждать пленки тугоплавких материалов, в том числе, их оксидов. В данной работе пленки оксида титана TiOx были получены испарением порошка состава Ti_3O_5, помещенного в молибденовый тигель, и затем исследованы *in situ* методом РФЭС. В зависимости от режимов испарения были получены пленки TiOx различного стехиометрического состава. Магнетронное осаждение пленок проведено распылением титановой (ВТ0) мишени с использованием установки ЭПОС в реакционной смеси аргона и кислорода с концентрациями от 0 до 10 объемных %.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках Соглашения № 075-15-2025-455 от 26.05.2025 г. с использованием оборудования ЦКП УдмФИЦ УрО РАН.

Литература:

[1] Li Y., Fang P., Fan X., Pei Y. // Semiconductor Science and Technology. 2020. V.35(5). P.055004.
[2] Park Y.R., Cho H., Wang G. // ACS Appl. Electron. Mater. 2022. V.4(7). P.3739–3748
[3] Valov I., Waser R., Jameson J.R., Kozicki M.N. // Nanotechnology. 2011. V.22. P.254003.

СД-IV-09
Структурные особенности расплава FLiNaK с добавкой фторидов РЗМ. Актуальность применения синхротронных методов для изучения его свойств

Власов М.И., Чернышев С.В., Зайков Ю.П.
Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
m_vlasov@ihte.ru

Расплавы солей щелочных и щелочноземельных металлов имеют широкое применение в различных процессах и технологиях. Одним из современных и активно развиваемых в настоящий момент направлений их использования является ядерная энергетика. В частности, солевые расплавы рассматриваются в качестве активной среды жидкосолевых ядерных реакторов (ЖСР), и эвтектическая смесь состава «46,5 мол.% LiF – 11,5 мол.% NaF – 42 мол.% KF» (или FLiNaK) является одним из наиболее перспективных вариантов [1]. Важный аспект успешного применения расплавов солей заключается в детальном понимании процессов их взаимодействия с соединениями переходных, в частности редкоземельных металлов (РЗМ). Последние выступают в роли имитаторов делящихся материалов, и также присутствуют в расплаве как непосредственно продукты деления. В этой связи, расширение и накопление знаний по данному направлению имеет несомненную актуальность на сегодняшний день, и одним из наиболее интересных, но одновременно и сложных, аспектов этого направления является изучение структурных свойства расплавов.

В данной работе рассматриваются результаты структурных исследований расплава FLiNaK с добавкой фторидов РЗМ, выполненные с применением метода спектроскопии оптического поглощения. Для таких исследований была разработана и изготовлена научная установка [2] на базе специализированного УФ-Вид-ИК спектрофотометра, интегрированного в перчаточный бокс в высокочистой инертной средой аргона (содержание влаги и кислорода в аргоне не более 10^{-4} об.%), позволяющая измерять спектры оптического поглощения расплавленных сред вплоть до температуры 2000 °C. В качестве примера, на рис. 1 представлены спектры оптического поглощения смеси FLiNaK–NdF_3–CeF_3, основные полосы в котором обусловлены f-f переходами иона Nd(III), служащего в нашем случае в роли метки. Анализ спектров выполнен с применением теории Джадда-Офельта [3], устанавливающей взаимосвязь между интенсивностью f-f переходов и расчетными параметрами Ω, которые, в свою очередь, связаны с локальным окружением f-элемента. Характер изменения рассчитанных Ω (рис. 2) указывает на то, что с ростом температуры расплава характерно увеличение степени ковалентности химической связи Ln–F и снижение среднего координационного числа Ln. С другой стороны, исходя из анализа спектров, с ростом температуры следует уменьшение расстояния Ln–F в комплексном ионе на основе иона РЗМ, что является нетипичным для таких систем и требует проверки с помощью иных методов.

В развитие полученных результатов перспективными для исследования структурных и химических особенностей солевых расплавов представляются синхротронные методы, в частности спектроскопия рентгеновского поглощения. Данный метод, являясь элемент-селективным, позволит установить особенности локальной структуры и валентные состояния

индивидуальных компонентов расплава, что крайне актуально для составов, содержащих d- (Cr, Ni, Co, Fe – т.е. компоненты конструкционных материалов) и f-элементы (РЗМ, U, Pu – т.е. делящиеся материалы, их имитаторы и продукты деления). Важное преимущество использования синхротронного излучения в таких исследованиях состоит в возможности реализации in-situ измерений при повышенных температурах и определение непосредственно межатомных расстояний. Полученные с помощью синхротронных методов сведения о валентном состоянии, локальной структуре расплавов солей будут способствовать оптимизации режимов электролиза в них и подходов к защите конструкционных материалов от коррозии.

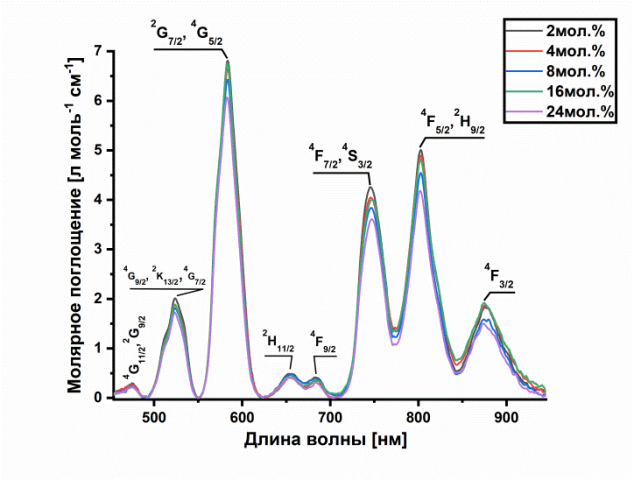


Рис. 1. Спектры оптического молярного поглощения для расплава FLiNaK-NdF_3 (2 мол.%)-CeF_3 в зависимости от концентрации CeF_3 при температуре 1140 K

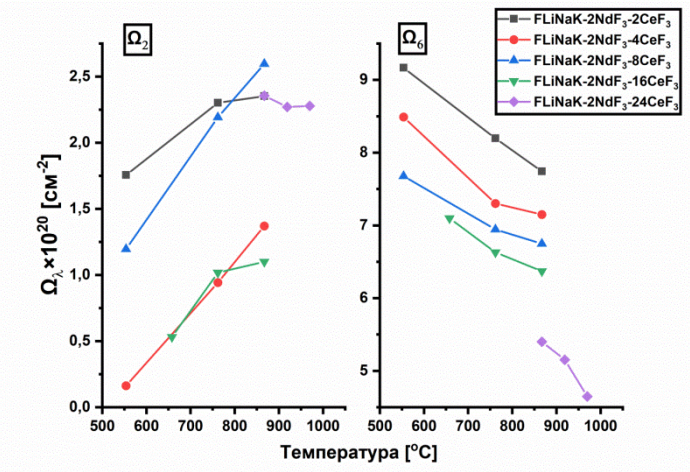


Рис. 2. Зависимость параметров Джадда-Офельта Ω_λ от температуры для расплава FLiNaK-NdF_3 (2 мол.%)-CeF_3 при различных содержаниях трифторида церия

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, государственное задание № 124032000068-8.

Литература:

[1] Serp J., Allibert M., Beneš O., et al. // Progress in Nuclear Energy. 2014. 77. P, 308-319.
[2] Патент РФ на изобретение № 2836124. Установка для исследования оптических характеристик расплавленных сред. Авторы: Зайков Ю.П., Власов М.И., Чернышев С.В.; опубл.: 11.03.2025 Бюл. 8
[3] Smentek L. // Molecular Physics. 2003. 101 (7). P. 893-897.

СД-IV-10

Сравнительное исследование структуры комплексов [M(Salen)] (M= Co, Ni, Cu) в конденсированном состоянии по данным рентгеновской абсорбционной спектроскопии и квантово-химических расчетов

Корусенко П.М.[1,2], Гаас В.А.[1,3], Катин К.П.[4], Виноградов А.С.[1]

1 – Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

2 – Омский государственный технический университет, Омск, Россия

3 – Институт неорганической химии имени А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

4 – Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

korusenko_petr@mail.ru

Электропроводящие полимеры, полученные на основе комплексов 3*d*-переходных металлов (M= V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu) с тетрадентатными N_2O_2 лигандами основаниями Шиффа, так называемые саленовые комплексы ([M(Salen)]) – являются перспективными материалами в многочисленных приложениях от разработки антибактериальных препаратов до создания промышленных катализаторов и электродов электрохимических накопителей энергии [1]. Основные преимущества этих полимеров обусловлены способностью координационных центров [MO_2N_2] мономеров [M(Salen)] участвовать в окислительно-восстановительных реакциях. При этом проводимость между этими центрами, т.е. перенос заряда, обеспечивается π-сопряженной электронной системой мономеров [2]. Однако для широкого использования электропроводящих полимеров poly-[M(Salen)] в современных технологиях необходимы детальные знания о процессах полимеризации их мономерных молекул [M(Salen)].

Настоящая работа посвящена получению новой информации об атомной структуре комплексов [M(Salen)] с M= Co, Ni, Cu в конденсированном состоянии на основе сравнительного анализа параметров их координационного центра [MO_2N_2], установленных в результате детального изучения M1*s* EXAFS спектров этих материалов и, дополненных данными квантово-химических расчетов в рамках DFT расчетов. В качестве основных моделей для комплексов [Ni(Salen)] и [Cu(Salen)] рассматривались две структуры: мономер и «M–M»-димер (рис. 1). В случае комплекса [Co(Salen)] помимо этих двух моделей дополнительно также была рассмотрена структура «M–O–M–O»-димера (рис. 1).

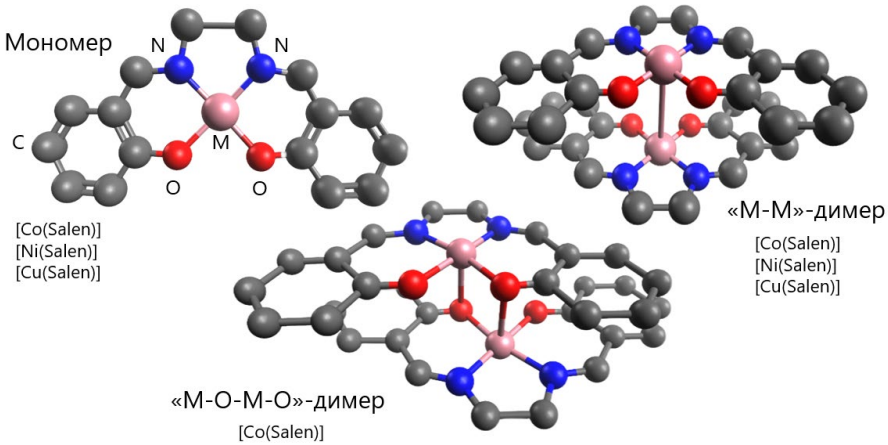


Рис. 1. Схематичные изображения вероятных моделей структуры комплексов [M(Salen)] в конденсированном состоянии. Атомы водорода не показаны

СД-IV-10

Синтез молекулярных комплексов [M(Salen)] в виде порошка был проведен по стандартной методике: к раствору свободного лиганда H_2(Salen) в этаноле добавляли ацетат соответствующего металла. Полученный осадок дополнительно очищали перекристаллизацией из этанола с последующей сушкой при 80 °C в условиях вакуума [3].

Измерения M1*s* EXAFS-спектров проводились с использованием экспериментальной станции «Структурное материаловедение» источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» в режиме на пропускание рентгеновского излучения через образец, используя энергии фотонов в диапазоне 7400–10000 эВ. Подготовка образцов к EXAFS измерениям состояла в предварительном измельчении соответствующего порошка [M(Salen)] и последующем прессовании смеси порошка образца (20 мг) с мелкодисперсным гексагональным нитридом бора, h-BN, (100 мг) в качестве биндера для обеспечения однородности образца до формирования таблетки толщиной около 0,5 мм.

Расчеты структурных фрагментов комплексов [M(Salen)] методом DFT проводились с использованием программного пакета GAMESS-US и визуализированы с помощью программного обеспечения ChemCraft. Использовалась комбинация базисных наборов 6-311+G** и lanl2tz+ для атомов салена и металла соответственно. Оптимизация геометрии структурных фрагментов проводилась с помощью гибридного функционала B3LYP. Ограничения симметрии не применялись.

В результате совместного анализа EXAFS-спектров и DFT расчетов выявлено, что основной структурной единицей (фрагментом) комплексов [Ni(Salen)] и [Cu(Salen)] в конденсированном состоянии является димер вида «M–M», тогда как для комплекса [Co(Salen)] такой структурной единицей является «M–O–M–O»-димер.

Благодарности: Авторы выражают благодарность Верещагину А.А., Левину О.В. за синтез мономеров, Храмову Е.В. и Петровой О.В. за помощь в проведении XAFS-измерений. Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ, проект FSWU-2024-0014.

Литература:

[1] Freire C., Nunes M., Pereira C., Fernandes D.M., Peixoto A.F., Rocha M. // Coordination Chemistry Reviews. 2019. V. 394. 104-134.
[2] Levin O.V.; Karushev M.P.; Timonov A.M.; Alekseeva E.V.; Zhang S.; Malev V.V. Electrochimica Acta. 2013. V. 109. 153-161.
[3] Yankin A.N., Lukyanov D.A., Beletskii E. V., Bakulina O.Yu., Vlasov P.S., Levin O.V. ChemistrySelect .2019. V.4. 8886-8890.

СД-IV-11

Кристаллическая структура модулированной фазы трис(пиразол-1-ил)метана

Гайдамака А.А.[1,2], Колыбалов Д.С.[2,3]

1 – Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирск, Россия

2 — Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

3 – ЦКП «СКИФ», Институт Катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия

a.gaidamaka@g.nsu.ru

Трис(пиразол-1-ил)метан ($C_{10}H_{10}N_6$) — скорпионатный лиганд, широко применяемый для получения металлокомплексов с различными функциональными свойствами, в частности, магнитными [1]. В работе получена новая полиморфная модификация трис(пиразол-1-ил)метана.

Образец был получен по методике, описанной в [2], очищен сублимацией и перекристаллизован из хлористого метилена. Набор рентгенодифракционных данных был получен с использованием монокристального дифрактометра Oxford Diffraction Gemini R Ultra (Mo Kα излучение) с CCD детектором. На дифрактограммах присутствовали саттеллитные дифракционные максимумы, которые могут быть описаны вектором модуляции с компонентами 0,498(5); 0,526(7); 0,024(5). Для решения структуры модулированной фазы использовалась программа Jana2020 [3]. Решение модулированной структуры проводилось в (3+1)-мерной пространственной группе *P*-1(*αβγ*)0. Параметры элементарной ячейки: *a*=7,7344(7) Å; *b*= 12,0472(11) Å; *c* =13,3138(14) Å; *α* = 63.142(10)°; *β*= 76.656(8)°; *γ*= 77.713(8)°; *V*= 1068.40(17) Å^3. Координаты и параметры атомных смещений всех атомов были уточнены в анизотропном приближении. В независимой части присутствуют две молекулы трис(пиразол-1-ил)метана. Позиционная модуляция проявляется во вращении пиразольных колец в молекулах трис(пиразол-1-ил)метана.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Программы «Приоритет-2030» в НГУ, стратегический проект «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий». Гайдамака А.А. (ИХКГ СО РАН) также благодарит Министерство науки и высшего образования РФ за финансовую поддержку в рамках госзадания (FWGF-2021-0004).

Литература:

[1] Vostrikova K. E., Sukhikh T. S., Lavrov A. N. //Inorganics. 2023. Vol. 11, 418, P. 1-15.
[2] Reger D.L. et al. // J. Organomet. Chem. 2000. Vol. 607. P. 120–128.
[3] Petříček V. et al. // Zeitschrift fur Krist. 2023. Vol. 238, № 7–8. P. 271–282.

СД-IV-12

Определение кристаллической структуры трис(3,5-диметилпиразол-1-ил)метана с использованием синхротронного излучения

Гайдамака А.А.[1,2], Колыбалов Д.С.[2,3], Лазаренко В.А.[4], Наумов А.А.[2]

1 – Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирск, Россия

2 — Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

3 – ЦКП «СКИФ», Институт Катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия

4- НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

a.gaidamaka@g.nsu.ru

Интерес к скорпионатным лигандам обусловлен их широкими возможностями в различных областях химии. Благодаря своей тридентатной природе и способности образовывать прочные и устойчивые координационные связи, они обеспечивают стабильность комплексов с широким рядом металлов. Их металлокомплексы представляют интерес как функциональные материалы, из-за потенциальных магнитных свойств и каталитической активности [1,2].

Трис(3,5-диметилпиразол-1-ил)метан относится к классу скорпионатных лигандов. Для этого соединения описаны две полиморфные модификации, но из-за экспериментальных ограничений кристаллическая структура высокотемпературной фазы была установлена только по данным порошковой дифракции [3]. Стабильность фаз при охлаждении не исследовалась.

Образец был получен по известной методике [4]. Монокристаллы нитевидной формы были получены сублимацией. Дифракционные данные были собраны при 100 К на станции Белок/РСА Курчатовского источника синхротронного излучения. Показано, что кристаллическая структура исследованной фазы близка к модели, предложенной в [3] на основании данных порошковой дифракции при 293 К.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Программы «Приоритет-2030» в НГУ, стратегический проект «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий». Гайдамака А.А. (ИХКГ СО РАН) также благодарит Министерство науки и высшего образования РФ за финансовую поддержку в рамках госзадания (FWGF-2021-0004).

Литература:

[1] Martins L. // Catalysts. 2017. Vol. 7. № 1. P. 12.
[2] Vostrikova K.E., Sukhikh T.S., Lavrov A.N. //Inorganics. 2023. Vol. 11, 418, P. 1-15.
[3] Ochando L.E. et al //Acta Cryst. 1997. Vol. B53, P. 939-944.
[4] Reger D.L. et al. //J. Organomet. Chem. 2000. Vol. 607. P. 120–128.

СД-IV-13

Формирование интерфазы в композитах на основе ВТ-6/B_4C при прямом лазерном выращивании

Герцель И.С.[1,2], Маликов А.Г.[2]

1 – Центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» ФИЦ «Институт катализа СО РАН», Кольцово, Россия

2 – Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия

i.s.gertsel@srf-skif.ru, gertsel@itam.nsc.ru

Развитие аддитивных технологий открывает новые возможности для создания композиционных материалов с заранее заданным структурно-фазовым составом [1]. Традиционные подходы к модификации титановых сплавов, таких как ВТ-6, сталкиваются с пределом по улучшению термической стабильности и износостойкости, что ограничивает их применение в авиакосмической и энергетической отраслях [2]. В данной работе предложен метод армирования титановой матрицы посредством введения частиц карбида бора (B_4C) в порошковую смесь, используемую в процессе прямого лазерного выращивания (ПЛВ).

Система Ti–B–C перспективна благодаря образованию упрочняющих фаз — TiB, TiB_2, TiC и других — в результате растворения B_4C в расплаве и диффузии компонентов в матрицу Ti-6Al-4V [4,5]. Композиты, формирующиеся *in situ* за счёт химических реакций в процессе синтеза, характеризуются повышенными физико-механическими свойствами [4].

Износостойкость таких материалов определяется, прежде всего, твёрдостью армирующих частиц [5]. Однако важную роль играет также межфазное сцепление, обеспечивающее удержание керамики при трении. Межфазная зона (интерфаза) может быть механической или химической. Создание композита с сильным межфазным взаимодействием позволяет достичь максимальной износостойкости.

Эксперименты по созданию композитных покрытий проведены на установке «Сварог», включающей иттербиевый волоконный лазер IPG (до 3 кВт, λ = 1,07 мкм) и пятиосевой манипулятор Fanuc 710i. Порошковая смесь ВТ-6/B_4C в соотношениях 90:10 и 85:15 (масс. %) подавалась через коаксиальное сопло Precitech. Ключевым варьируемым параметром процесса выступала плотность энергии $E = P/(D \cdot V)$ (Дж/мм^2). Для снижения остаточных напряжений применялся предварительный нагрев подложки.

Дифракционные исследования выполнены в Центре коллективного пользования «Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения» на установке ВЭПП-4/ВЭПП-2000 [6] в Институте ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН. Регистрация дифракционных колец осуществлялась с помощью двухкоординатного детектора Mar345. При накоплении пучок имел круглое сечение с диаметром 300 мкм. Количественный анализ выполнен методом полнопрофильного анализа Ритвельда в программе GSAS-II [7] с использованием структурных данных из баз Materials Project [8].

Методом рентгенофазового анализа впервые показано наличие в составе композита фазы TiB_xC_y. Ранее данная фаза была обнаружена при магнетронном напылении в работе [9], а теоретически предсказана в [10]. По предположению данная фаза отвечает за межфазное

удержание (образует химическую интерфазу). Были выявлены три типа локального окружения частиц B_4C, определяемых значением переданной энергии E, а также определен количественный фазовый состав композитов. Наибольшая износостойкость достигается при E=14,3 Дж/мм² и 15 мас. % B_4C, где зафиксированы умеренная концентрация керамики и фазы TiB_xC_y. При высокой степени растворения керамики (высокое значение E) наблюдается охрупчивание, что приводит к росту износа. Понижение энергии не инициирует процесс растворения керамики, однако приводит к низкому межфазному удерживанию из-за чего частицы керамики выпадают в область трения, что снижает износостойкость.

Таким образом, показано, для получения максимальной износостойкости необходимо реализовать повышенную концентрацию керамических частиц в покрытии и сформировать сильную химическую и механическую интерфазу (совокупность формирования TiB_xC_y и TiB + TiC + TiB_2 соответственно) для частиц B_4C.

Благодарности: Соответствующие результаты получены при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Минобрнауки России соглашение № 075-15-2025-479, а также часть работы выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] В. Фомин *и др.*, «Структурно-фазовое состояние и механические свойства титаноматричного композита на основе сплава Ti64 и керамики TiB 2 , полученного при лазерной наплавке», */ Физическая мезомеханика*, т. 26, вып. 5, с. 2023, 2023, doi: 10.55652/1683-805X_2023_26_5_17.

[2] A. Gomez-Gallegos, P. Mandal, D. Gonzalez, N. Zuelli, и P. Blackwell, «Studies on Titanium Alloys for Aerospace Application», *Defect and Diffusion Forum*, т. 385, сс. 419–423, 2018, doi: 10.4028/www.scientific.net/DDF.385.419.

[3] M. S. K. K. Y. Nartu *и др.*, «In situ reactions during direct laser deposition of Ti-B4C composites», *Scripta Materialia*, т. 183, сс. 28–32, 2020, doi: https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2020.03.021.

[4] Z. Hua, L. Xiong, M. Zhang, C. Wang, G. Mi, и P. Jiang, «Microstructure evolution and tribological properties of (TiB+TiC)/Ti–6Al–4V composites fabricated via in situ laser-directed energy deposition of wire and powders in an underwater environment», *Composites Part B: Engineering*, т. 263, с. 110817, 2023, doi: https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2023.110817.

[5] C. Shuai, J. Xie, Z. Yu, Y. Yang, и C. Wang, «Enhanced wear resistance of in-situ nanoscale TiC reinforced Ti composites fabricated by additive manufacturing», *Vacuum*, т. 230, вып. May, с. 113704, 2024, doi: 10.1016/j.vacuum.2024.113704.

[6] A. I. Ancharov, «The Use of Hard Synchrotron Radiation for Diffraction Studies of Composite and Functional Materials», *Russian Physics Journal*, т. 60, вып. 3, сс. 543–549, июл. 2017, doi: 10.1007/s11182-017-1106-7.

[7] B. Toby и R. Dreele, «GSAS-II: the genesis of a modern open-source all purpose crystallography software package», *Journal of Applied Crystallography*, т. 46, сс. 544–549, мар. 2013, doi: 10.1107/S0021889813003531.

[8] A. Jain *и др.*, «Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation», *APL Materials*, т. 1, вып. 1, с. 11002, июл. 2013, doi: 10.1063/1.4812323.

[9] J. Lin, J. J. Moore, B. Mishra, M. Pinkas, и W. D. Sproul, «The structure and mechanical and tribological properties of TiBCN nanocomposite coatings», *Acta Materialia*, т. 58, вып. 5, сс. 1554–1564, 2010, doi: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.10.063.

[10] Швейкин Г П и Ивановский А Л, «Химическая Связь И Электронные Свойства Боридов Металлов», *Успехи Химии*, т. 63, вып. 9, сс. 751–775, 1994.

СД-IV-14

Влияние высокого давления и низких температур на кристаллические структуры полиморфных модификаций парацетамола и его аналогов

Жданкин Г.И.[1,2], Захаров Б.А.[1,2], Болдырева Е.В.[1]
1 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия
g.zhdankin@g.nsu.ru

Сравнительные исследования структур полиморфных модификаций молекулярных кристаллов и соединений со сходным молекулярным строением в условиях различных давлений и температур важны для понимания структурообразующих факторов [1]. В последние десятилетия возрос также интерес к изучению соединений, входящих в состав лекарственных препаратов, так как важные для фармацевтической промышленности свойства, такие как растворимость, таблетируемость и биодоступность, для различных полиморфных модификаций могут различаться. Одной из перспективных модельных систем для изучения молекулярных кристаллов и биополимеров является N-(4-гидроксифенил)ацетамид, или парацетамол, благодаря конформационной гибкости молекул и наличию в кристаллических структурах Ван-дер-Ваальсовых, π-π, CH$\cdots\pi$ взаимодействий, нескольких типов доноров и акцепторов для образования водородных связей. Это первое лекарственное вещество, исследованное в условиях гидростатического сжатия [2,3]. В настоящее время известно несколько полиморфных модификаций парацетамола [4,5], но наиболее интересны из них формы **(I)** и **(II)**, так как они могут существовать в условиях окружающей среды. Наиболее существенное отличие этих модификаций проявляется в силе межмолекулярных водородных связей: в стабильной моноклинной форме **(I)** ($P2_1/n$) водородные связи сильнее по сравнению с более плотной метастабильной ромбической формой **(II)** (*Pbca*) в диапазоне температур 100–300 К. При повышении давления возрастает роль Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий и термодинамически стабильной становится форма **(II)** [3,6]. Несмотря на одинаковые объемные сжимаемости, анизотропия деформации этих полиморфных модификаций сильно различается [2,3]. Форма **(I)** переходит в форму **(II)** при определенном протоколе варьирования давления в порошковом образце [3] либо через перекристаллизацию из раствора при высоком давлении [7]. Форма **(II)** переходит в форму **(I)** при нагревании до ~100 °C [8]. Если для формы **(I)** при повышении давления были известны изменения координат атомов, то для формы **(II)** — только изменения параметров элементарной ячейки [3].

Почти не проводилось сравнительных исследований влияния высокого давления и низких температур на кристаллические структуры молекулярных аналогов парацетамола. Поэтому были исследованы N-(4-гидроксифенил)-2,2-диметилпропанамид (соединение **(1)**, метильная группа парацетамола замещена на третбутильную группу) и N-(п-толил)-2,2-диметилпропанамид (соединение **(2)**, гидроксильная группа дополнительно замещена на метильную группу). Изменение строения кристаллизуемой молекулы влияет на возможность

образования межмолекулярных взаимодействий и упаковку молекул. Данные монокристальной рентгеновской дифракции позволили сравнить эффекты влияния давления и температуры на соединения **(1)** и **(2)** с данными для двух полиморфных модификаций парацетамола [9]. Кооперативное поведение водородных связей в условиях варьирования давления и температуры в соединении **(1)** приводит к одинаковой сжимаемости вдоль двух главных осей эллипсоида деформации аналогично форме **(II)** парацетамола при повышении давления. Также в соединениях **(1)** и **(2)** наблюдается небольшое термическое расширение вдоль одной из главных осей эллипсоида деформации. Объемные сжимаемости двух форм парацетамола и соединения **(1)** при повышении давления или понижении температуры примерно одинаковы в отличие от соединения **(2)**, которое сжимается сильнее из-за наличия меньшего количества водородных связей в элементарной ячейке.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации: проекта «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий» программы «Приоритет-2030» в Новосибирском государственном университете, и проекта Государственного задания для ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] Boldyreva E. V. High Pressure Crystallography: Elucidating the Role of Intermolecular Interactions in Crystals of Organic and Coordination Compounds // Understanding Intermolecular Interactions in the Solid State: Approaches and Techniques / ed. Chopra D. Cambridge: Royal Society of Chemistry. – 2018. – С. 32–97.
[2] Boldyreva E. V. et al. Anisotropic crystal structure distortion of the monoclinic polymorph of acetaminophen at high hydrostatic pressures //Structural Science. – 2000. – Т. 56. – №. 2. – С. 299-309.
[3] Boldyreva E. V. et al. Effect of high pressure on the polymorphs of paracetamol //Journal of thermal analysis and calorimetry. – 2002. – Т. 68. – №. 2. – С. 437-452.
[4] Shtukenberg A. G. et al. Melt crystallization for paracetamol polymorphism //Crystal Growth & Design. – 2019. – Т. 19. – №. 7. – С. 4070-4080.
[5] Smith S. J. et al. Polymorphism in paracetamol: Evidence of additional forms IV and V at high pressure //The Journal of Physical Chemistry A. – 2014. – Т. 118. – №. 31. – С. 6068-6077.
[6] Nelyubina Y. V. et al. “Higher density does not mean higher stability” mystery of paracetamol finally unraveled //Chemical Communications. – 2010. – Т. 46. – №. 20. – С. 3469-3471.
[7] Fabbiani F. P. A. et al. High-pressure recrystallisation—a route to new polymorphs and solvates //CrystEngComm. – 2004. – Т. 6. – №. 82. – С. 505-511.
[8] Boldyreva E. V. et al. DSC and adiabatic calorimetry study of the polymorphs of paracetamol //Journal of thermal analysis and calorimetry. – 2004. – Т. 77. – №. 2. – С. 607-623.
[9] Drebushchak T. N., Boldyreva E. V. Variable temperature (100–360 K) single-crystal X-ray diffraction study of the orthorhombic polymorph of paracetamol (p-hydroxyacetanilide) //Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials. – 2004. – Т. 219. – №. 8. – С. 506-512.

СД-IV-15

Изучение локальной атомной структуры Pt и взаимодействия металл-носитель на разных стадиях приготовления катализатора 0.05-1%Pt/γ-Al_2O_3 методом XAFS, связь с каталитическими свойствами

Зверева В.В.[1], Бельская О.Б.[2], В.И. Зайковский[3], Трубина С.В.[1]
1 – Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Центр новых химических технологий ИК СО РАН, Омск, Россия
3 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
zvereva@niic.nsc.ru

Pt/γ-Al2O3 является одними из самых популярных катализаторов благодаря высокой активности и стабильности, играет важную роль при окислении выхлопных газов, широко используется для органического синтеза и нефтепереработки. Взаимодействие металл-носитель – один из важнейших факторов, который определяет геометрические, химические и электронные свойства нанесенных частиц платины [1-5], а также играет важную роль в их стабилизации [2, 4]. Систематического понимания специфических взаимодействий платины с разными носителями, а также на разных этапах синтеза катализаторов, формирования окисленных форм (3D- и 2D-оксиды, атомарно-дисперсная Pt) и их восстановления до металла не хватает, несмотря на множество исследований в этой области. Такие знания имеют решающее значение для понимания каталитического поведения Pt-содержащих материалов.

В настоящей работе было изучено влияние малых концентраций Pt (0.05, 0,25, 0,5 и 1% масс. Pt) и специфических взаимодействий платина-носитель на всех стадиях синтеза катализатора: адсорбция H2PtCl6 на поверхности гамма-Al2O3, окислительная и восстановительная обработки. В литературе такого рода исследований для концентраций Pt менее 0.3% масс. не обнаружено. Полученные нами данные показывают, что при уменьшении содержания платины на поверхности γ-Al_2O_3 меняется состав адсорбированных комплексов (увеличивается доля гидролизованных форм), а также обнаруживается сильная связь с носителем (Pt-O-Al) на стадии окисления, которая частично сохраняется и на стадии восстановления (рис. 1а). Интересно, что на стадии окисления (O2, 500^{o}C) оксиды платины не образуются (путь рассеяния Pt-O-Pt, характерный для оксидов, отсутствует) (рис. 1а), тогда как в большинстве случаев в литературе сообщается о формировании 3D [1, 6] и 2D-оксидов [7, 8] (в зависимости от содержания платины и типа носителя). Для восстановленных образцов (H2, 500^{o}C) координационное число Pt-Pt (по данным EXAFS) снижается при уменьшении содержания платины. Полученные данные согласуются с данными STEM-HAADF, которые показывают формирование плоских кластеров для образцов с содержанием платины 0.25-1% масс. Восстановление образцов с наименьшей концентрацией (0.05% масс.) способствует формированию атомарно диспергированной платины (рис. 1б,в). Каталитическая способность последней была проверена на примере реакции дегидроциклизации н-гептана при температурах 460-500^{0}C. Было обнаружено, что Pt, присутствующая преимущественно в атомарном состоянии (0.05%Pt/γ-Al_2O_3) проявляет максимальную активность в превращении н-гептана во всем диапазоне температур, а также показывает максимальную селективность в образовании толуола (при 500^{o}C).

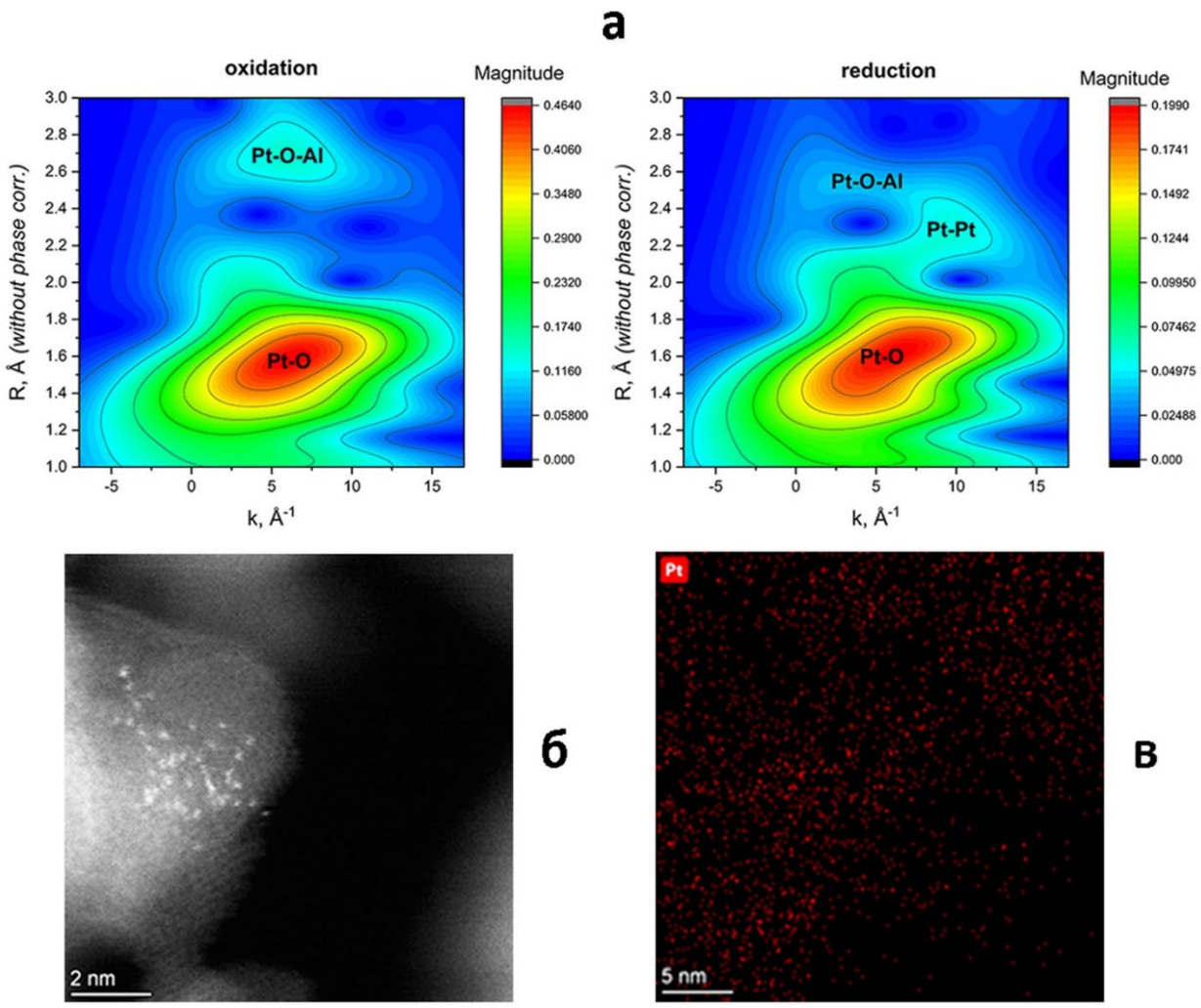


Рис 1. (а) Wavelet-преобразованный XAFS для Pt-L_3 на стадиях окисления (O_2) и восстановления в токе H_2 (550^0C); (б) STEM-HAADF; (в) EDX-картирование для образца 0.05%Pt/γ-Al2O3.

Благодарности: За проведение измерений XAFS на канале BM20-ROBL (ESRF, Гренобль, Франция) благодарим профессора К.О. Квашнину. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института неорганической химии СО РАН (проект 125021302132-4) и Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0039).

Литература:

[1] Lee J., Jang E. J., Oh D.G., et al. // Journal of Catalysis. 2020. V.385. P. 204–212.
[2] Dessal C., Sangnier A., Chizallet C., et al. // Nanoscale. 2019. V.11. P. 6897.
[3] Kocemba I., Śmiechowicz I., Jędrzejczyk M., et al. // Catalysts. 2021. V.11. P. 1475.
[4] Li H., Wang H., Shi X. // Physica E. 2020. V.117. P. 113804.
[5] Ivanova A.S., Slavinskaya E.M., Gulyaev R.V., et al. // Applied Catalysis B. 2010. V.97. P. 57–71.
[6] Lee J., Jang E.J., Kwak J.H. // Applied Catalysis A. 2019. V. 569. P. 8–19.
[7] Gorczyca A., Moizan V., Chizallet C., et al. // Angewandte Chemie. 2014. V.126. P. 12634–12637.
[8] Dessal C., Sangnier A., Chizallet C., et al. // Nanoscale. 2019. V.11. P. 6897–6904.

СД-IV-16

Структурированные катализаторы на основе нанотубулярного гидросиликата $(Ni,Co)_3Si_2O_5(OH)_4$ для паровой конверсии глицерина

Храпова Е.К., Омаров Ш.О., Иванова А.А., Кириленко Д.А., Красилин А.А.
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
a.a.ivanova@mail.ioffe.ru

Процесс парового риформинга глицерина является одним из наиболее перспективных методов получения водорода из возобновляемых источников, в связи с чем возникает потребность в разработке катализаторов, сочетающих высокую активность и стабильность.

В данной работе исследовались моно- и биметаллические структурированные катализаторы нанотубулярной морфологии, полученные путём термического восстановления гидросиликатов состава $(Ni_{1-x}Co_x)_3Si_2O_5(OH)_4$ (где x = 0; 0,4; 1) в Ar-H_2 смеси. Катализаторы сохраняли нанотубулярную морфологию носителя, при этом образовавшиеся металлические наночастицы никеля, кобальта или никель-кобальтового сплава распределялись в силикатной матрице с различной степенью дисперсности [1].

По результатам каталитических испытаний образцов было установлено, что монометаллический Ni-катализатор (x = 0) демонстрировал высокую начальную активность, но в то же время был подвержен быстрой дезактивации вследствие процесса коксообразования. Монометаллический Co-катализатор (x = 1) обладал наименьшей активностью из исследуемого ряда образцов из-за особенностей восстановления металла из матрицы. Биметаллический катализатор (x = 0,4) демонстрировал синергетический эффект, который заключался в более высоком показателе стабильности, меньшей склонности к закоксовыванию, увеличении степени конверсии глицерина и выхода водорода с течением времени реакции в сравнении с монометаллическими образцами.

Катализаторы на основе нанотубулярных гидросиликатов обладают рядом преимуществ, таких как простота синтеза, возможность варьирования содержания переходных металлов в составе и термическая стабильность, которые обеспечивают высокую каталитическую активность [2].

Литература:

[1] Khrapova E. K. et al. Mono-and bimetallic catalysts for the steam reforming of glycerol based on $(Co_x, Ni_{1-x})_3Si_2O_5(OH)_4$ phyllosilicate nanoscrolls //Microporous and Mesoporous Materials. 2025. Т. 389. С. 113552.
[2] Krasilin A.A., Khrapova E.K., Maslennikova T.P. Cation doping approach for nanotubular hydrosilicates curvature control and related applications // Crystals. 2020. Т. 10. №. 8. С. 654.

СД-IV-17

Влияние растворенного углерода на активацию метана на палладии

Каичев В.В.[1], Винокуров З.С.[2], Сараев А.А.[1,2], Лалетина С.С.[1,3], Шор Е.А.[3], Юданов И.В.[1,4]
1 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия
3 – Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск, Россия
4 – Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
vvk@catalysis.ru

Растворение углерода в приповерхностных слоя палладия и образование поверхностной фазы PdCx неоднократно наблюдалось в ходе различных каталитических реакций. Это происходит в результате разложения реагентов с образованием атомов углерода, которые легко диффундируют в приповерхностные слои палладия занимая октаэдрические полости гцк решетки металла. Показано, что в случае селективного гидрирования алкинов в алкены растворенный углерод ингибирует выход на поверхность растворенного водорода, который является реакционноспособным, но неселективным в гидрировании, т.е. положительно влияет на эффективность катализатора [1]. В реакциях окисления углеводородов на палладии фаза PdCx также может образовываться, однако вопрос о влиянии этого процесса на каталитические свойства до сих пор остается дискуссионным. Более того, в литературе приводятся достаточно противоречивые данные. Так, Габаш с соавторами [2], предположил, что растворение углерода приводит к изменению распределения продуктов – поверхностная фаза PdCx преимущественно катализирует окисление этилена в CO, а не в CO_2. В то же время Матвеев с соавторами [3] также наблюдал образование PdCx при окислении пропилена на Pd(551), при этом поверхностный углерод препятствовал адсорбции реагентов и уменьшал скорость окисления, однако наличие углерода в приповерхностных слоях палладия не оказывало влияния на селективность. Еще большую путаницу вызвали публикации Бычкова с соавторами [4,5], в которых на основе результатов исследования автоколебаний при окислении метана на палладиевых катализаторах были сделаны выводы о том, что осаждение и последующее удаление углерода играет решающую роль в колебательном механизме, и что карбонизированный металлический палладий отвечает за максимальную активность в этой реакции.

В данной работе, для понимания влияния подповерхностного/растворенного углерода на активность палладия в окислении углеводородов, были проведены совместные экспериментальные и теоретические исследования. Методами рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии в режиме in situ с использованием СИ исследовали образование карбида палладия в условиях реакции, его реакционную способность по отношению к кислороду, а также влияние растворенного углерода на активность в окисления метана на палладии. Влияние приповерхностного углерода на активацию метана на палладии также было исследовано теоретически с использованием расчетов в рамках теории функционала плотности.

Установлено, что причиной возникновения автоколебаний является периодическое окисление и восстановление палладия. В тоже время было показано, что при окислении

метана в ходе автоколебаний действительно в моменты высокой активности наблюдается образование карбида палладия – фазы PdCx. Однако, результаты проведенных нами квантово-химических расчетов свидетельствуют о том, что растворение углерода приводит к небольшому росту активационных барьеров отдельных стадий разложении метана. А так как активация метана является лимитирующей стадией в реакции окислении метана, то, следовательно, растворение углерода и образование карбида палладия не может приводит к увеличению скорости окисления метана на металлическом палладии. В данном случае образование фазы PdCx является лишь следствием высокой активности металлического палладия – при окислении метана происходит накопление на поверхности палладия атомов углерода (продуктов разложения метана), которые легко растворяются в приповерхностных слоях палладия. Этот процесс оказывает незначительное влияние на активность палладия. Фактически палладий выступает аккумулятором промежуточных продуктов – атомов углерода, которые сначала диффундируют в объем палладия, а затем, когда концентрация углерода на поверхности становится малой, выходят на поверхность и окисляются до CO и CO_2.

Полученные результаты подтверждают необходимость совместного использования теоретических и экспериментальных методов исследования при изучении каталитических реакций. Такой подход обеспечивает более глубокое понимание сложных физико-химических процессов, протекающих на поверхности катализаторов. Для изучения динамических процессов целесообразно применять рентгеновские методы с использованием СИ, что повышает чувствительность и заметно улучшает временное разрешение.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерство науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-032).

Литература:

[1] Teschner D., Borsodi J., Wootsch A., Revay Z., Hävecker M., Knop-Gericke A., Jackson S.D., Schlögl R. // Science. 2008. V. 320. P. 86–89.
[2] Gabasch H., Kleimenov E., Teschner D., Zafeiratos S., Hävecker M., Knop-Gericke A., Schlögl R., Zemlyanov D., Aszalos-Kiss B., Hayek K., Klötzer B. // J. Catal. 2006. V. 242. P. 340–348.
[3] Matveev A.V., Kaichev V.V., Saraev A.A., Gorodetskii V.V., Knop-Gericke A., Bukhtiyarov V.I., Nieuwenhuys B.E. // Catal. Today. 2015. V. 244. P. 29–35.
[4] Bychkov V.Yu.; Tyulenin Yu.P., Slinko M.M., Shashkin D.P., Korchak V.N. // J. Catal. 2009. V. 267. P. 181–187.
[5] Bychkov V.Yu., Tulenin Yu.P., Slinko M.M., Khudorozhkov A.K., Bukhtiyarov V.I., Sokolov S., Korchak V.N. // Catal. Commun. 2016. V. 77. P. 103–107.

СД-IV-18

Исследование реальной структуры объёмных кристаллов оксида галлия

Калганов Д.А.[1], Бауман Д.А.[1], Панов Д.Ю.[1], Спиридонов В.А.[1], Иванов А.Ю.[1,2], Романов А.Е.[1]
1 – Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
2 – ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
kalganov@itmo.ru

Кристаллическое качество выращенных методом Чохральского объемных кристаллов β-Ga_2O_3, легированных хромом (0,05 мол.% Cr), исследовано методами рентгеновской высокоразрешающей дифрактометрии (HRXRD) и синхротронной топографии (XRT). При помощи трёхосевой рентгеновской дифрактометрии получена карта рассеяния (θ-2θ сканирование) от исследуемой области образца (Рис.1*а*) в условиях симметричного 6 0 0 рефлекса (Cuk_α, Ge2 2 0). Изображение дифракционной топографии образца в пучке синхротронного излучения ("белый" спектр, Al 1мм) получены в условиях отражения $1\,0\,\bar{1}$ (Рис.1*б*) на оборудовании Курчатовского специализированного источника синхротронного излучения – станция Медиана.

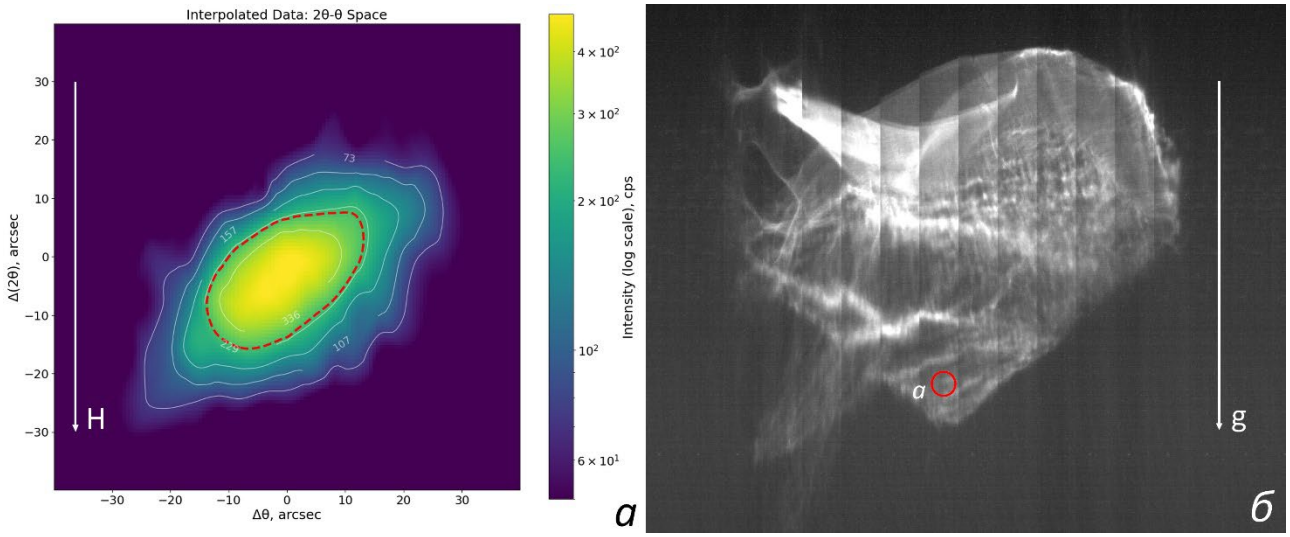


Рис. 1. Карта рассеяния (θ-2θ сканирование) от исследуемой области образца -а и дифракционная топография поверхности образца - б

Ранее в объёмных кристаллах оксида галлия было показано существование области микропластической деформации [1-2]. Установление природы соответствующих эффектов требует точной характеризации дефектной структуры объёмных кристаллов. Проведённые исследования позволяют связать данные о микропластичности в исследуемых образцах с плотностью дислокаций, а также наличием микротрещин в системах $\{0\,0\,1\}$ и $\{1\,0\,0\}$, характеризуемых результатами исследований [1-2].

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 24-12-00229, https://rscf.ru/project/24-12-00229/.

Литература:

[1] Kaminskii V.V. et al. // Condensed Matter and Interphases. 2023. V. 25. №. 4. P. 548-556.
[2] Kaminskii V. V. et al. // Materials Physics and Mechanics. 2024. V. 52. №. 5. P. 48-54.

СД-IV-19

Исследование структуры фотоинертного представителя фоточувствительных комплексов, $[Co(NH_3)_5NO_2]C_3H_2O_4$, при варьировании температуры и давления

Калинина П.П., Захаров Б.А.[1], Болдырева Е.В.
НГУ, Новосибирск, Россия
p.kalinina@g.nsu.ru

Семейство соединений с общей формулой $[Co(NH_3)_5NO_2]XY$, где XY = $2Br^-$, $2Cl^-$, $2I^-$, $Cl^-NO_3^-$, $2(NO_3^-)$, $Br^-NO_3^-$, известно тем, что в них при воздействии видимого излучения протекает внутримолекулярная связевая нитро-нитрито изомеризация, сопровождающаяся механическим откликом кристалла – разрушением, прыжками, изгибом и т.д. [1 и ссылки в нем]. Новое соединение в этом семействе, малонат, $[Co(NH_3)_5NO_2]C_3H_2O_4$, которое было получено впервые в рамках данной работы, является фотоинертным, несмотря на то что электронная структура комплексного катиона такая же, как у всех фотоактивных соединений в этой серии. Кристаллическая структура была проанализирована при нормальных условиях, при облучении, а также при варьировании температуры (охлаждении до 100 К) и давления (гидростатическом сжатии до 6,1 ГПа), было проведено сравнение структуры со структурами ранее известных соединений для объяснения такого поведения.

Ключ к объяснению следует искать во взаимодействиях потенциально фотоактивного катиона с его кристаллическим окружением. «Пассивная реакционная полость» является важным фактором, влияющим на фотоизомеризацию, однако анализ одних лишь пустот вокруг реакционно активной группы недостаточен для объяснения реакционной способности или инертности комплексного катиона. Не менее важно знать, как этот катион взаимодействует со своим кристаллическим окружением – это, в основном, определяется наличием и прочностью водородных связей, а также как окружение может «адаптироваться» к изменению координации нитро-лиганда к кобальту [2]. Было показано, что в случае соединений $[Co(NH_3)_5NO_2]XY$ наиболее важным фактором, влияющим на фотоизомеризацию, является прочность водородных связей нитрогруппы. Водородные связи нитро-лиганда в малонате короче и прочнее, чем в других представителях ряда $[Co(NH_3)_5NO_2]XY$. Анизотропия структурной деформации при охлаждении и гидростатическом сжатии для малоната также отличается от того, что наблюдалось ранее для других солей ряда $[Co(NH_3)_5NO_2]XY$.

Обратимый изосимметричный фазовый переход «монокристалл-монокристалл» наблюдался при давлениях между 2,4 и 3,0 ГПа. Показано, что фазовый переход при повышении давления не связан с заполнением существующих пустот в кристаллической структуре молекулярными частицами, а обусловлен скачкообразными изменениями в сетке водородных связей, возникающими из-за вращения карбоксильных групп. В фазе высокого давления появляются новые прочные контакты нитрогруппы с амминогруппами соседних комплексных катионов, что позволяет предположить, что фотоизомеризация также не может протекать при высоком давлении. Результаты исследований приняты к публикации в журнале Acta Cryst. B [3].

Благодарности: Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00293, https://rscf.ru/project/24-22-00293/.

Литература:

[1] Naumov, P., Chizhik, S., Panda, M. K., Nath N. K., Boldyreva, E. // Chem. Rev. 2015. T. 115(22). C. 12440-12490.
[2] Boldyreva, E. V. // Solid State Ionics. 1997. T. 101. C. 843-849.
[3] Kalinina P.P., Zakharov, B. A., Boldyreva E. V. // Acta Cryst. B. 2025. принята к публикации.

СД-IV-20

Использование метода синхротронного излучения с целью оптимизации энергетических и механических свойств порошков Al

Еселевич Д.А.[1], Шевченко В.Г.[1], Конюкова А.В.[1], Винокуров З.С.[2], Толочко Б.П.[3,4]
1 – Институт Химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
2 – ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН, Наукоград Кольцово, Россия
3 – Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия
4 – Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
shevchenko@ihim.uran.ru

Проблема реализации энергетического потенциала Al, используемого в качестве горючего в энергетических конденсированных системах (ЭКС) различного назначения, связана с физико-химическими и теплофизическими свойствами металла и оксида, образующегося на поверхности при взаимодействии с окислительными средами. В качестве модификаторов рассмотрены: Ca и Ba, введенные в объем частиц; гидро- и сольвогели на основе V_2O_5 и растворы формиатов на основе Mn, Fe, Co и Ni, нанесенные на поверхность частиц порошков. Использование гелеобразных модификаторов обеспечило максимальный контакт между компонентами смеси, что исключило изменение морфологии частиц металла и привело к повышению сыпучести. В случае 3D-печати, одной из основных причин низкого качества конечных изделий на основе алюминиевых сплавов, полученных методом селективного лазерного сплавления (СЛС), также является высокая термодинамическая стабильность оксида Al_2O_3, присутствующего на поверхности частиц порошков. Наличие оксидной пленки и в этом случае, затрудняет получение качественного материала, за счет ухудшения процесса консолидации и образования пор при лазерном нагреве и охлаждении. Помимо оптимизации технологических параметров печати, показана возможность воздействия на барьерный слой и металлическое ядро за счет легирования алюминия лигатурой Al_3V.

В работе представлены результаты исследований реакционной активности и особенностей фазообразования в процессе окисления модифицированных порошков на основе Al методами термогравиметрии (ТГ) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), а также рентгеновской дифракции синхротронного излучения (СИ) in situ при нагреве в воздушной среде. Показано, что совместное применение термического и фазового анализов с использованием СИ позволяет получить, в более короткие сроки, представление о механизме окисления, ускорить процесс выбора модификаторов различной природы, для оптимизации эксплуатационных свойств дисперсных систем на основе алюминия и технологических параметров синтеза материалов с управляемыми свойствами поверхности. За счет методов ТГ и ДСК оптимизируется концентрация модифицирующей добавки, а в сочетании с СИ, становится возможным выявление особенностей и последовательностей фазообразования непосредственно в ходе окисления, что позволяет выявить причины, определяющие механизм процесса.

Благодарности: Работа выполнена в соответствии с государственным заданием Института химии твердого тела УрО РАН № 124020600007-8.

СД-IV-21

Изучение локальной структуры карбонатов лантанидов методом PDF

Шефер К.И.[1], Корытцева А.К.[2], Князев А.В.[2]
1 – ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН им. Г.К. Борескова, Кольцово, Россия
2 – Нижегородский государственный ун иверситет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
koak@chem.unn.ru

Соединения, образующиеся в тройной системе Ln_2O_3-CO_2-H_2O (Ln – лантанид), являются известными и широко применяемыми в химии и технологии лантанидов. Так гидроксокарбонаты $LnOHCO_3$ группы минералов бастнезита и козоита являются, наряду с монацитом, одними из промышленно важных источников получения лантанидов в мире. Малорастворимые и легкоразлагающиеся до оксидов карбонаты используются для получения чистых оксидов Ln и введения их в состав керамических материалов. Карбонаты и гидроксокарбонаты являются также промежуточными фазами, образующимися при эксплуатации материалов на основе Ln_2O_3 во влажном воздухе. При этом состав соединений, образующихся в указанной системе, зависит от парциального давления воды и диоксида углерода, температуры и кислотности среды. Поэтому изучение условий их кристаллизации важно для оптимального синтеза карбонатов лантанидов заданного состава, структуры и кристалличности, а также для минимизации их деградации в ходе эксплуатации.

Данная работа посвящена аморфным карбонатам неодима, диспрозия и иттербия [1]. Соединения получали гомогенным гидролизом мочевины, термическое поведение изучали дифференциальной сканирующей калориметрией и термогравиметрией с масс-спектральным-анализом выделяющихся газов. Состав определяли по данным масс-спектрометрии и потери массы $Nd_2O_3 \cdot 2{,}7CO_2 \cdot 3{,}9H_2O$; $Dy_2O_3 \cdot 2{,}4CO_2 \cdot 3{,}1H_2O$; $Yb_2O_3 \cdot 1{,}9CO_2 \cdot 3.1H_2O$. Отсутствие значительных пиков Брэгга на порошковых дифрактограммах позволило характеризовать соединения как рентгеноаморфные. Для характеристики ближнего порядка в структуре изучаемых соединений проводили анализ распределения атомных пар или pair distiribunion function (PDF) analysis. Для этого дифракционные картины регистрировали в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения (Институт ядерной физики СО РАН) на канале ВЭПП-4, длина волны λ=0,1784Å.

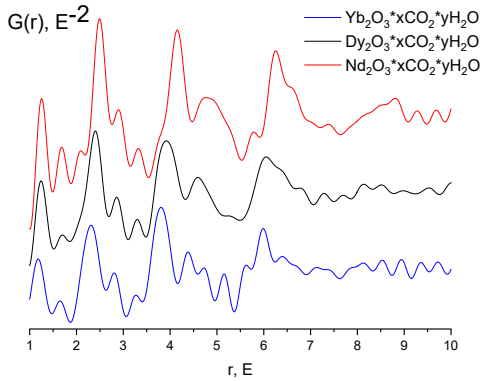


Рис. 1. Кривые PDF изучаемых образцов.

Полученные кривые PDF (рис. 1) показывают, что локальное упорядочение во всех образцах имеет похожую природу, а межатомные расстояния увеличиваются в ряду Yb, Dy, Nd, в соответствии с увеличением их ионного радиуса. На основании известных структурных данных о соединениях в системе Ln_2O_3-CO_2-H_2O получены модельные кривые PDF для отдельных пар расстояний в их структурах. Показано, что локальная структура образцов соответствует структуре минерала бастнезита (пр. гр. P-6, № ICSD 422733, 422727). При этом образцы состоят из частиц размером 14 Å для образцов, содержащих Yb и Nd и18 Å для образца с Dy.

Вероятно, изучаемые образцы являются аморфными предшественниками кристаллических $NdOHCO_3$ и $DyOHCO_3$ и имеют малый размер частиц. Их нестехиометрический (относительно бастнезита) состав может быть связан с особенностями роста частиц, в ходе которого кристалл может захватывать неравновесное количество примесей, образуя структурные дефекты. Со временем кристаллы «залечивают» дефекты и выбрасывают не равновесно захваченные примеси (в данном случае карбонатные и гидроксильные группы) обратно в среду, приводя к образованию кристаллов заданного состава и кристаллической структуры.

Таким образом, полученные данные расширяют знания о процессах кристаллизации карбонатов лантанидов, а также помогают проводить целенаправленный синтез соединений заданного состава, кристалличности и размера частиц.

Благодарности: Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН (FWUR-2024-0042). В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ "Комплекс ВЭПП-4 – ВЭПП-2000" в ИЯФ СО РАН.

Литература:

[1] Koryttseva A.K., Navrotsky A. Formation and energetics of amorphous rare earth (RE) carbonates in the RE_2O_3–CO_2–H_2O system // Thermochimica Acta. V. 692. № 692. 2020. P. 178753.

СД-IV-22

Operando XANES-FTIRS исследование дегидрирования этанола на монослойных V_2O_5/TiO_2 и V_2O_5/CeO_2 катализаторах

Сараев А.А.[1,2], Кремнева А.М.[1,2], Айдаков Е.Е.[1,2,3], Проценко Б.О.[4], Гуда А.А.[4], Сафонова О.В.[5], Каичев В.В.[1,3]

1 – Институт катализа им Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – ЦКП СКИФ, Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия

3 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия

4 – Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

5 – Центр фотонной науки PSI, Институт Пауля Шеррера, Филлиген, Швейцария

a.m.kremneva@srf-skif.ru

Нанесенные катализаторы на основе оксида ванадия проявляют высокую активность в ряде промышленно важных реакций, в частности, в окислительном дегидрировании этанола в ацетальдегид. В ходе многочисленных исследований по определению взаимосвязи между молекулярной структурой активных центров и их каталитической активностью было обнаружено, что как материал носителя, так и содержание ванадия могут влиять на атомную структуру и дисперсность частиц ванадия и, таким образом, влиять на каталитическую активность [1, 2]. Например, при взаимодействии с поверхностью диоксида титана ванадий может образовывать изолированные мономерные (VO_x), полимерные структуры $(VO_x)_n$ и 3D наночастицы V_2O_5 при содержании ванадия, больше теоретического монослоя. На металл-оксидных носителях, таких как SiO_2, Al_2O_3, Nb_2O_5 и т. д., в основном образовываются 3D кристаллиты V_2O_5 независимо от содержания ванадия. Считается, что поверхностные монослойные структуры оксида ванадия более активны, чем кристаллиты ванадия, а удельная активность изолированных и полимерных поверхностных структур ванадия сопоставима. Однако активность оксида ванадия, нанесенного на диоксид титана, диоксид циркония и церия может различаться в несколько раз, несмотря на то, что все эти катализаторы с низким содержанием ванадия образуют в основном поверхностные соединения ванадия. Это свидетельствует о том, что не только атомная структура активных центров влияет на каталитическую активность. Поскольку реакция дегидрирования этанола протекает по механизму Марса–ван Кревелена, активность может быть напрямую связана с окислительно-восстановительными свойствами нанесенного диоксида ванадия.

Для более полного понимания влияния материала носителя на активность поверхностных структур оксида ванадия в реакции дегидрирования этанола, мы провели исследование восстановления монослойных катализаторов V_2O_5/TiO_2 и V_2O_5/CeO_2 непосредственно в реакции неокислительного и окислительного дегидрирования этанола до ацетальдегида. Совместное использование спектроскопии рентгеновского поглощения в околопороговой области (XANES) с применением количественного анализа спектров методами машинного обучения (МО) и ИК-Фурье спектроскопии (ИКС) позволило более детально изучить восстановление, как катионов ванадия, так и катионов носителя, количественно

проанализировав эволюцию их локальной атомной и электронной структуры в ходе реакции, а также получить информацию о продуктах реакции при варьировании температуры и состава реакционной смеси.

Катализаторы были приготовлены пропиткой по влагоемкости TiO_2 (Hombifine N) и изготовленного методом Пекини дисперсного CeO_2. Измерения XANES проводились на станции SuperXAS Швейцарского источника синхротронного излучения (SLS) в Институте Пауля Шеррера (Швейцария) в специальной каталитической ячейке проточного типа [3]. После предварительной обработки катализаторов в потоке O_2/Ar (300°C, 30 мин) были получены спектры XANES V K-края и Ti *K*-края или Ce L_3-края катализаторов V_2O_5/TiO_2 и V_2O_5/CeO_2 в процессе ступенчатого нагрева в диапазоне температур 50-300°C в потоках этанола/Ar и смеси этанола и кислорода/Ar. Для количественного анализа спектров XANES в этой работе была использована недавно разработанная методология [4] на основе МО, совмещающая анализ главных компонент (PCA) для определения количества присутствующих отдельных химических компонентов, и метод разрешения многомерных кривых (MCR) для определения их индивидуальных спектров и профилей концентрации в динамических условиях.

Анализ спектров ИКС показал, что катализатор V_2O_5/TiO_2 более активен, чем V_2O_5/CeO_2, в реакции неокислительного дегидрирования этанола до ацетальдегида. После добавления O_2 в реакционную смесь реакция идет до полного окисления с образованием CO и CO_2. Используя методы МО для анализа данных XANES, было установлено, что в катализаторе V_2O_5/TiO_2 катионы V^{5+} в среде этанола восстанавливаются до V^{4+} и V^{3+}, что сопряжено с образованием кислородных вакансий на носителе, при этом не изменяет химическое состояние титана. Такая способность к глубокому восстановлению может быть предпосылкой для четырёх-электронного переноса, необходимого для синтеза уксусной кислоты из этанола. В катализаторе V_2O_5/CeO_2 напротив, катионы V^{5+} восстанавливаются только до V^{4+}, что сопровождается частичным восстановлением катионов Ce^{4+} этанолом. Таким образом, фундаментальное различие в способности способствовать глубокому окислению, определяется не только дисперсностью ванадия, но и непосредственно участием носителя в регуляции окислительно-восстановительной способности ванадия, либо в качестве пассивного наблюдателя (TiO_2), либо активным участием в процессе компенсации заряда (CeO_2).

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR -2024-0032), а также стратегического академического лидерства ЮФУ («Приоритет 2030»). Авторы выражают благодарность Поповой Г.Я., Данилевич Е.В., Фёдоровой Ю.Е. и Булавченко О.А. за помощь в работе.

Литература:

[1] Litvintseva K. A. et al. //The Journal of Physical Chemistry C. 2024. Т. 128. №. 8. С. 3193-3203.
[2] Litvintseva K., Kaichev V. //Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2025. С. 1 -18.
[3] Chiarello G. L. et al. //Review of Scientific Instruments. 2014. Т. 85. №. 7.
[4] Protsenko B. O. et al. //The Journal of Physical Chemistry C. 2025. Т. 129. №. 13. С. 6551-6551.

СД-IV-23

Возможности метода рентгеновской спектроскопии поглощения для диагностики состояния и локальной структуры функциональных наноматериалов

Кривенцов В.В.
ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
kriven@mail.ru

Значительный прогресс источников СИ, начиная с последней трети прошлого века по настоящее время, привел к тому, что метод рентгеновской спектроскопии поглощения в «жестком» диапазоне (XANES/EXAFS) стал общепризнанным мощным инструментом исследования состояния и локальной структуры для разнообразных систем в различных агрегатных состояниях: сплавов, высокодисперсных систем, растворов, стекол, ультраразбавленных систем. Многочисленные варианты методик XANES/EXAFS успешно развиваются в Центрах синхротронного излучения, как за рубежом, так и в России (Москва, Новосибирск). Следует отметить, что метод демонстрирует высокую эффективность в исследованиях, когда применение традиционных структурных методов проблематично, например, при изучении наноразмерных систем “сложного” состава, с характерным размером ~1-10 нм и низким содержанием по исследуемому элементу. Заведомо, к подобным наносистемам, можно отнести значительную часть функциональных наноматериалов.

В представленном докладе, на примере выборки работ, выполненных за последние годы, на станции EXAFS спектроскопии Сибирского Центра Синхротронного и Терагерцового излучения (СЦТСИ, Новосибирск), рассмотрены аппаратурные и методические особенности, методики обработки экспериментальных данных и анализа полученной структурной информации. Для широкого круга исследованных функциональных наноматериалов продемонстрированы возможности рентгеновской спектроскопии поглощения в «жестком» диапазоне (XANES/EXAFS), как самостоятельного метода, так и в комплексе с другими физическими методами исследования – РФА СИ, ПЭМВР, СЭМ, РФЭС и др.

Показана перспективность использованного комплексного подхода для исследования различных функциональных наноматериалов: одноатомных (атомарно-диспергированных) каталитических систем, капсулированных упорядоченных наноструктур (для задач термоэлектрики и магнетизма), перспективных наноматериалов (для задач биоматериаловедения), нанокомпозитных катализаторов (для задач экологии и зеленой химии), наноуглеродных материалов (для задач ядерной медицины и хранения актиноидов), модельных образцов тонких пленок сложного состава и др.

Можно ожидать, что полученная новая информация будет способствовать развитию технологий создания экономически выгодных высокоэффективных функциональных наноматериалов с заданными структурно-функциональными свойствами.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН.

СД-IV-24

Исследование (методом XAFS) модельных металлоуглеродных нанокомпозитов, перспективных для задач атомной промышленности

Кривенцов В.В.[1], Байрамуков В.Ю.[2]
1 – ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ПИЯФ, НИЦ "Курчатовский институт", Гатчина, Россия
kriven@mail.ru

Сегодня современные технологии длительного хранения отходов ядерного топлива и другие задачи атомной промышленности, ядерной медицины требуют разработки и создания новых функциональных материалов. Наноуглеродные структуры (фуллерены, углеродные нанотрубки и другие формы углерода) являются перспективными материалами. Их свойства – термостойкость, электропроводность, теплопроводность, прочность – могут быть улучшены за счет введения металлов. Ключевым принципом изоляции радиоактивных отходов является наличие нескольких барьеров, сдерживающих распространение радионуклидов в окружающей среде. Одним из методов первичной иммобилизации радиоактивных отходов является использование металлоуглеродных нанокомпозитных матриц. Также эти наноматериалы могут быть использованы в ядерной медицине – в качестве контрастирующих средств. Существуют различные традиционные способы создания металлоуглеродных нанокомпозитов, то есть введения атомов различных металлов в углеродную матрицу. Была развита новая технология, основанная на пиролизе (термическом разложении в бескислородной среде) соединений-предшественников - молекул дифталоцианина металла. Эксперименты были проведены на наносистемах иттрий-углерод и европий- углерод. В качестве предшественников использовались металлоорганические соединения иттрия и европия. Методом рентгеновской спектроскопии поглощения (XAFS) были исследованы образцы новых металлоуглеродных нанокомпозитов Y/C и Eu/C, разработанных в Петербургском институте ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт» (Гатчина). Спектры EXAFS (Y-K, Eu-L3) всех исследованных образцов были зарегистрированы на станции EXAFS спектроскопии (СЦСТИ, Новосибирск). Установлено, что в зависимости от температуры пиролиза металл может стабилизироваться в различных формах – в виде атомарно диспергированных иттрия и европия, а также в виде кластеров и наночастиц. Рассчитаны длины межатомных связей и соответствующие координационные числа. Подробно рассмотрены возможные варианты структурных моделей. Данные XAFS хорошо согласуются с результатами ПЭМВР, РФЭС, РФА СИ. Полученная новая информация будет способствовать развитию технологии создания высокоэффективных металлоуглеродных нанокомпозитов с заданными структурно-функциональными свойствами.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН.

СД-IV-25

Структурное исследование модифицированных оксидов циркония методом рентгеновской спектроскопии поглощения

Кривенцов В.В.
ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
kriven@mail.ru

В настоящее время, смешанные оксиды, имеющие структуру флюорита базового состава ZrO_{2-x}, модифицированные переходными металлами, имеют широкое применение для упрочнения ферритных сталей, для специальных приложений. Известно что, данный материал используется для создания оболочки ТВЭЛов реакторов нового поколения на быстрых нейтронах, работающих в условиях высоких температур и жесткого облучения. В докладе показаны результаты рентгеноспектрального исследования (XANES/EXAFS) состояния и локальной структуры образцов оксидов циркония (модифицированных иттрием, магнием, железом), приготовленных соосаждением и прокаленных при различных температурах. Спектры XANES/EXAFS (Zr-K, Y-K, Fe-K) исследуемых образцов регистрировались в СЦСТИ, г. Новосибирск. Показано, что со стороны иттрия спектры XANES исследованных образцов однотипны. Можно предположить, что зарядовое состояние и ближайшее окружение иттрия также практически не изменяется в зависимости от состава образцов. Для всех образцов установлено, что иттрий занимает низко-симметричные места с понижением координационного числа Y-O, в сравнении с таковыми для классического флюоритного высоко-симметричного положения. Вопрос о присутствии значительного вклада кластеров оксида иттрия на основании данных XANES/EXAFS остается открытым, поскольку вероятно существует несколько возможных наборов фаз в различных пропорциях (нано-кластеры оксида иттрия + искаженная флюоритная фаза + пирохлорная фаза) дающих схожий результирующий вид спектра. Со стороны циркония, спектры XANES имеют незначительные различия. Видимо для циркония, при неизменном состоянии заряда, изменения в ближайшем кислородном окружении обусловлены различным составом образцов. Установлено, что кривые радиального распределения атомов (РРА), полученные из спектров EXAFS исследуемых образцов, имеют ряд характерных особенностей. Наблюдаются только первые координационные сферы Me-O и Me-Me, однако дальние координационные сферы, в области ~4.0-6.5Å, практически отсутствуют, что указывает на значительные искажения дальнего порядка. Локальное окружение иттрия практически стабильно, при изменении состава образцов, что может свидетельствовать о формировании кластеров, включающих только элементы Y и O. Локальное окружение циркония зависит от состава и предыстории образцов, так как наблюдаются различия в кривых РРА. Согласно EXAFS данным (со стороны циркония), для исследованных образцов можно предполагать, как образование искаженной флюоритной нано-фазы оксида циркония - ZrYzOx (частично аморфизованной), со значительными дефектами по анионной и катионным подрешеткам, так и образование искаженной пирохлорной оксидной фазы, которая также имеет дефекты по обеим подрешеткам. Вполне вероятно, что для реальной структуры могут быть также реализованы

варианты смеси данных фаз в различных пропорциях. Было высказано предположение, что наличие Y-O кластеров препятствует уточнению структур с использованием модели статистического твердого раствора со структурой флюорита. Рассчитаны длины межатомных связей и соответствующие координационные числа. Детально рассмотрены возможные варианты структурных моделей. Дополнительно образцы были исследованы методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Данные, полученные различными методами, хорошо согласуются между собой.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН.

СД-IV-26

Применение синхротронного излучения для *in situ* рентгенодифракционного исследования десорбции водорода из композитов на основе гидрида магния с добавлением наноразмерных катализаторов

Кудияров В.Н., Эльман Р.Р., Курдюмов Н., Кенжиев А., Лаптев Р.С., Сыртанов М.С.
Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
kudiyarov@tpu.ru

Гидрид магния считается одним из наиболее перспективных материалов для хранения водорода, хотя, имеет некоторые проблемы, такие как высокое значение энергии активации десорбции водорода. Для решения этой проблемы предлагается добавлять в гидрид магния наноматериалы, в частности, металлорганические каркасы, углеродные нанотрубки, наноразмерные частицы металлов (Ni, Al, Cr). В настоящее время отсутствует детальное понимание механизмов получения композитов на основе гидрида магния и наноматериалов, как и понимание влияния добавок на энергию активации и температуру десорбции водорода в зависимости от параметров синтеза композита. Кроме того, данные, полученные при различных значениях параметров измельчения, сильно различаются, а в некоторых работах влияние наноматериалов на водородные свойства гидрида магния вообще не подтверждено. Таким образом, важно определить влияние добавок наноматериалов на свойства хранения водорода гидридом магния при различных параметрах измельчения.

Настоящая работа посвящена применению синхротронного излучения для исследования десорбции водорода из композитов на основе гидрида магния и наноматериалов методом *in situ* рентгеновской дифракции на источнике синхротронного излучения. Рентгеновские измерения процесса термостимулированного распада гидрида магния проводились на станции «Прецизионная дифрактометрия» Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучения Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН. Измерения проводились с использованием синхротронного излучения накопителя ВЭПП-3.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания «Наука» в рамках научного проекта № FSWW-2023-0005.

СД-IV-27

РЗЭ-Люминесцентные алмазные композиты с пленочной и ядро-оболочка архитектурами

Кузнецов С.В.[1], Седов В.С.[1], Мартьянов А.К.[1], Тяжелов И.А.[1], Александров А.А.[1], Ясыркина Д.С.[1], Захарова А.С.[1], Ширманкин А.В.[1], Коршунов В.М.[2], Цориева А.В.[2], Тайдаков И.В.[2], Воронов В.В.[1]

1 – Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия
2.– Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия
kouznetzovsv@gmail.com

Алмазная фотоника на основе синергетического сочетания алмаза с внедренными люминесцентными наночастицами различных классов веществ является новым направлением в оптическом материаловедении. Данный подход позволяет использовать химическую устойчивость и рекордные величины теплопроводности алмаза в сочетании с люминесценцией легирующих ионов в наночастицах. В результате становится возможным настраивать спектр люминесценции алмаза под различные применения, что значительно улучшает вариативность методик получения алмазных люминесцентных материалов по сравнению с ранее использованными подходами за счет внедрения гетероатомов в кристаллическую решетку алмаза с образованием оптического центра типа примесный атом – вакансия.

Разработанные композиты возможно использовать для визуализации высокоэнергетичных пучков синхротронов и лазеров на свободных электронах.

Методика изготовления алмазных композитов в условиях роста алмаза посредством метода осаждения из паровой фазы (CVD) подробно описана в [1].

В докладе представлен обзор результатов по получению и исследованию люминесцентных композитов с пленочной и ядро-оболочка архитектурой с внедренными наночастицами оксидов и фторидов, легированных различными редкоземельными ионами (Er, Nd, Yb, Eu, Ce).

Предложено объяснение радикального изменения спектра люминесценции алмазных композитов по сравнению со спектром люминесценции исходных наночастиц за счет интенсивного взаимодействия частиц с метан-водородной плазмой, создаваемой в процессе роста алмаза и образованием поверхностных слоев на частицах.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00401-П, https://rscf.ru/project/22-13-00401/.

Литература:

[1] Sedov V., Kuznetsov S., Martyanov A., Ralchenko V. // *Functional Diamond*. 2022. **2:1**. 53

СД-IV-28

Катализаторы на основе окисленного g-C_3N_4 с малым содержанием Pt для получения водорода

Куренкова А.Ю.[1,2], Харина С.Н.[2], Сараев А.А.[1,2]
1 – ЦКП «СКИФ» Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия
2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
kurenkova@catalysis.ru

Развитие альтернативных источников энергии остается актуальной задачей в связи с неуклонно растущим спросом на энергоресурсы и увеличивающейся антропогенной нагрузкой на окружающую среду. Одним из важнейших направлений является разработка и внедрение различных фото- и электрокаталитических систем преобразования и хранения энергии, например, в процессах получения водорода. Наиболее эффективными катализаторами процесса выделения водорода из водных растворов являются платиносодержащие катализаторы, что ограничивает внедрение каталитических систем на их основе в виду высокой стоимости платины. Уменьшение содержания платины в композитном катализаторе позволяет снизить его стоимость, что, однако, сопровождается снижением каталитической активности. Таким образом, актуальной задачей является разработка эффективных и доступных катализаторов, содержащих платину, для систем преобразования и запасания энергии.

В данной работе синтезированы композитные катализаторы Pt/g-C_3N_4 с использованием g-C_3N_4, полученного традиционным методом (образцы Pt/CN) и частично окисленного g-C_3N_4 (Pt/CNO) [1]. Синтез g-C_3N_4 проводили путём прокаливания меламина при 600 °C в течение 2 ч. Последующая окислительная обработка полученного порошка проводилась в 37% водном растворе H_2O_2 при температуре 140 °C в течение 14 ч. Затем на поверхность синтезированных порошков CN и CNO осаждали частицы платины с содержанием 0.1, 0.5 и 1 масс. %. Исследование активности полученных катализаторов проводилось в реакции фотокаталитического получения водорода из водных растворов органических доноров электронов (глюкозы, этанола, триэтаноламина (TEOA)) под действием светодиодного источника излучения (440 нм).

Результаты каталитических тестов показали, что окислительная обработка порошка g-C_3N_4 приводит к значительному росту активности катализаторов на его основе. Катализатор 1% Pt/CNO обладает значительно более высокой активностью, чем 1% Pt/CN во всех исследованных системах доноров электронов, что указывает на универсальность предложенного подхода к синтезу композитных катализаторов. Комплексом физико-химических методов исследования установлено, что обработка порошка g-C_3N_4 в растворе перекиси приводит к образованию кислородсодержащих групп на поверхности, при этом объемная структура g-C_3N_4 сохраняется. Кроме того, после окислительной обработки удельная площадь поверхности g-C_3N_4 возрастает более, чем в 2 раза, а размер частиц сокатализатора уменьшается с 4.5 до 1.5 нм. Отличительной особенностью катализатора 1% Pt/CNO также является особенная морфология платиновых частиц. Как на поверхности CN, так

и на поверхности CNO, платина находится в металлическом состоянии. Однако, на поверхности CNO частицы платины образуют “core-shell” структуры с металлическим ядром размером до 4 нм в окружении одиночных атомов платины. Данное явление наблюдается на изображениях электронной микроскопии, а также подтверждается значительным ростом интенсивности пика на спектрах EXAFS, соответствующего связи платины с атомами, принадлежащими структуре графитоподобного нитрида углерода.

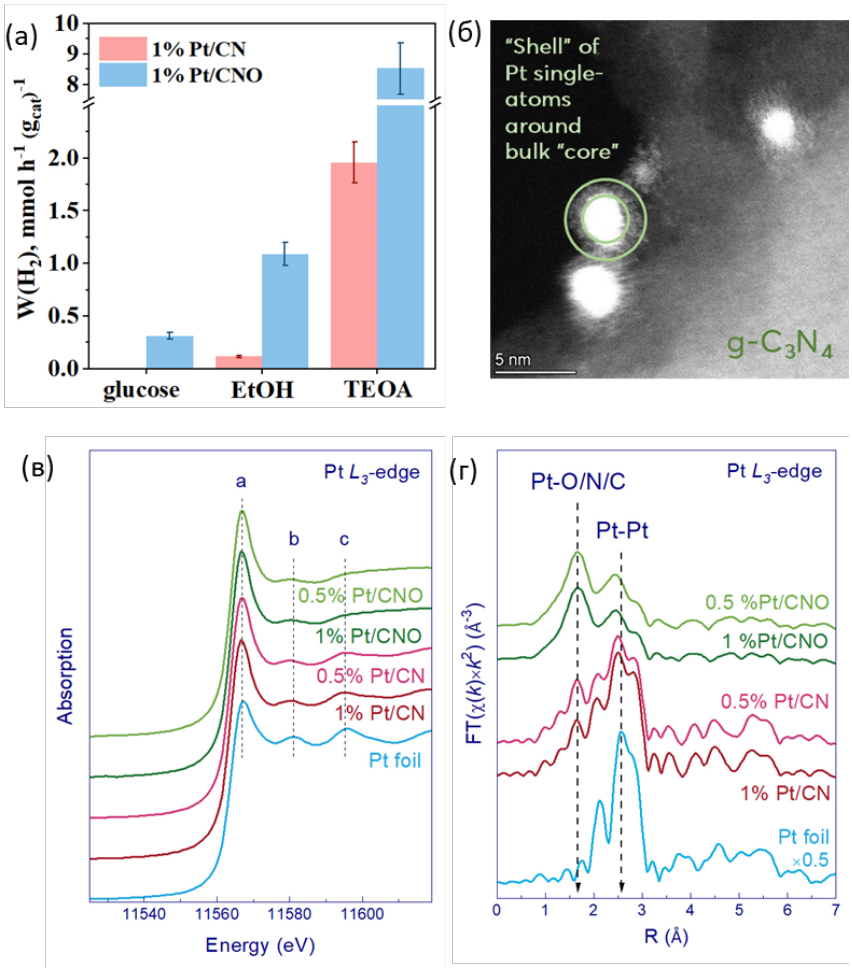


Рис. 1. (а) Активность катализаторов 1% Pt/CN и 1% Pt/CNO; (б) HR TEM изображение катализатора 1% Pt/CNO; XANES (в) и EXAFS (г) спектры L_3-края Pt катализаторов Pt/CN и Pt/CNO.

Стоит отметить, что снижение содержания платины с 1 до 0.5 масс. % позволило сохранить активность катализатора на основе CNO: скорость выделения водорода из водного раствора глюкозы составила 213 и 222 мкмоль $ч^{-1}$ $г_{кат}^{-1}$ для образцов 1% Pt/CNO и 0.5% Pt/CNO, соответственно. Дальнейшее понижение содержания платины до 0.1 масс. % привело к снижению активности только в 2 раза (до 113 мкмоль $ч^{-1}$ $г_{кат}^{-1}$) по сравнению с катализатором 1% Pt/CNO. Таким образом, использование окисленного g-C_3N_4 является перспективным подходом к созданию композитных катализаторов получения водорода.

Литература:

[1] Kharina S., Kurenkova A., Aydakov E., Mishchenko D., Gerasimov E., Saraev A., Zhurenok A., Lomakina V., Kozlova E. // Applied Surface Science. 2025. V.698. 163074:1-12.

СД-IV-29

Изучение влияния подложки и отжига на сенсорные свойства дисульфида молибдена методами РФЭС и NEXAFS

Булушева Л.Г.[1], Федосеева Ю.В.[1], Лаврухина С.А.[1], Сысоев В.И.[1], Максимовский Е.А.[1], Макарова А.А[2], Окотруб А.В.[1]

1 – Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Physical Chemistry, Institute of Chemistry and Biochemistry, Free University of Berlin, 14195 Berlin, Germany

x-rayspectroscopy@mail.ru

Химрезестивные газовые сенсоры являются самым простым, недорогим и легко интегрируемым типом сенсорного элемента с рядом преимуществ, таких как малые габаритные размеры, простота конструкции и изготовления. 2D полупроводники с высоким отношением поверхности к объему и стабильностью в различных химических средах перспективны для сенсорных приложений [1]. Дисульфид молибдена (MoS_2) относится к классу 2D материалов, обладающих высоким отношением поверхности к объему и превосходными электронными свойствами, в этой связи он может быть использован для высокопроизводительных приложений для обнаружения вредных газов в воздухе. В настоящее время, MoS_2 широко изучается для обнаружения диоксида азота (NO_2) при комнатной температуре. Идеальные чешуйки MoS_2 имеют края с молибденовыми и серными окончаниями [2]. Избыточное содержание серы приводит к образованию пар $S2^{2-}$ [3]. Более высокий сенсорный отклик, наблюдаемый для краевых слоев MoS_2 [4], может быть обеспечен как краевым молибденом, так и серой, причем в последнем случае сера может находиться в различных состояниях: Mo–S–Mo или Mo–S_2. Слабосвязанная краевая сера легко удаляется отжигом в вакууме [5, 6]. Также ранее было показано, что углеродная подложка может действовать как восстановитель, инициируя образование фаз с дефицитом серы вплоть до Mo_2S_3 [7]. Таким образом, комбинация MoS_2/графен может быть идеальной системой для получения краев с молибденовым окончанием путем отжига, что ползволит улучшить сенсорные характеристики материала.

В данной работе мы исследовали влияние природы подложки на формирование покрытия MoS_2 из прекурсора тетратиомолибдата аммония ($(NH_4)_2MoS_4$), изменение этого покрытия при отжиге в условиях сверхвысокого вакуума (СВВ) и сенсорные характеристики полученных образцов. В качестве подложек использовались кремниевая пластина с окисленной поверхностью (Si/SiO_2) - MoS_2/SiO_2, многослойный графен, синтезированный методом химического осаждения из газовой фазы (CVD- графен) - MoS_2/G, и расслоенная графеновая пленка, полученная лазерным восстановлением фторированного графена (rFG) - MoS_2/rFG. Покрытия MoS_2 были получены путем нанесения равного количества водного раствора ($(NH_4)_2MoS_4$ на подложки с последующим добавлением соляной кислоты и нагреванием в вакууме при 400 °C. Электронное состояние образцов определялось методами РФЭС и NEXAFS спектроскопии на синхротронной станции BESSY II до и после отжига в сверхвысоком вакууме (СВВ) в камере спектрометра при 1000 °C. А также было произведено сравнение РФЭС спектров до и после тестирования сенсора.

СД-IV-29

Изучение сенсорных характеристик, отожженных MoS2/SiO2, MoS2/rFG и MoS2/G по отношению к NO_2 показало, что отклик для первых двух образцов может быть только при повышенных температурах, и сенсоры практически не восстанавливаются. В то время как, MoS2/G работал при комнатной температуре и показал высокую чувствительность, равную 4,8 % ppm^{-1}, низкий предел обнаружения - 18 ppb по отношению к NO_2, умеренное время отклика и восстановления, а также высокую селективность к NO_2 по сравнению с газом NH_3. Такие хорошие характеристики сенсора связаны с доступной поверхностью вертикально ориентированных малых наночастиц MoS2, прочной связью с графеном, что обеспечивает быстрый отклик сенсора, и окислением атомов молибдена на краях, что изменяет взаимодействие MoS_2 с NO_2 и NH_3.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 23-73-00048.

Литература:

[1] Wu, R.; Hao, J.; Wang, Y. Recent Advances in Engineering of 2D Layered Metal Chalcogenides for Resistive-Type Gas Sensor. // Small. 2024. T. 20. P. 2404821
[2] T. Li, G. Galli, Electronic properties of MoS2 nanoparticles // J. Phys. Chem. 2007. T. 111 P. 16192–16196
[3] S.G. Stolyarova, A.A. Kotsun, Y.V. Shubin, V.O. Koroteev, P.E. Plyusnin, Y.L. Mikhlin, M.S. Mel'gunov, A.V. Okotrub, L.G. Bulusheva, Synthesis of porous nanostructured MoS2 materials in thermal shock conditions and their performance in lithium-ion batteries // ACS Appl. Energy Mater. 2020. T.3. P. 10802–10813.
[4] S.-Y. Cho, S.J. Kim, Y. Lee, J.-S. Kim, W.-B. Jung, H.-W. Yoo, J. Kim, H.-T. Jung, Highly enhanced gas adsorption properties in vertically aligned MoS2 layers // ACS Nano. 2015. T. 9. P. 9314– 9321.
[5] R.G. Dickinson, L. Pauling, The crystal structure of molybdenite // J. Am. Chem. Soc. 1923. T. 45. P. 1466-1471
[6] P. Afanasiev, Synthetic approaches to the molybdenum sulfide materials // C.R. Chimie. 2008. T. 11. P. 159–182.
[7] Z. He, W. Que, Molybdenum disulfide nanomaterials: Structures, properties, synthesis and recent progress on hydrogen evolution reaction // Appl. Mater. Today. 2016. T. 3. P. 23–56.

СД-IV-30

Использование метода ARPES в области мягкого рентгеновского спектра для исследования границы раздела HfO_2/Si и других материалов для микроэлектроники

Лев Л.Л.[1,2], Строков В.Н.[2], Зенкевич А.В.[1]
1 – Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Московская область, Россия
2 – Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, 5232, Villigen-PSI, Switzerland
lev.ll@mipt.ru

Исследование физических процессов, происходящих на границе материалов, используемых в микроэлектронике, представляет интерес как с точки зрения фундаментальной науки, так и для решения прикладных задач в различных областях, таких как материаловедение, биология, инженерия и микроэлектроника. В производстве микросхем и электронных компонентов границы раздела между различными полупроводниковыми материалами определяют их функциональные характеристики, такие как проводимость и быстродействие. Свойства границы раздела, такие как образование дефектов и накопление носителей заряда, напрямую влияют на стабильность, производительность и долговечность компонентов. Понимание и контроль этих явлений позволяют создавать более надежные и высокопроизводительные устройства, например, управлять переносом заряда и предотвращать деградацию материалов.

В свою очередь, фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES) представляет собой уникальный экспериментальный метод прямого определения зонной структуры $E(k)$ кристаллических твердых тел [1]. Использование синхротронного излучения добавляет, помимо высокой интенсивности рентгеновского излучения и улучшенного энергетического разрешения, переменную энергию фотонов (hv), позволяющую осуществлять точную навигацию в трехмерном k-пространстве и возможность настройки глубины зондирования, определяемой кинетической энергией фотоэлектронов. Перенос эксперимента ARPES в диапазон энергий фотонов мягкого рентгеновского излучения (soft-X-ray, SX-ARPES) увеличивает глубину зондирования метода в 3-5 раз по сравнению с обычными экспериментами ARPES в диапазоне вакуумного ультрафиолета, позволяя тем самым получить доступ к скрытым интерфейсам и гетероструктурам, которые лежат в основе электронных устройств [2]. Такие применения SX-ARPES ранее были продемонстрированы для различных полупроводниковых, оксидных и гибридных гетероструктур (см., например, [3-5]).

В докладе мы представляем примеры использования SX-ARPES для детального изучения интерфейса между ультратонкими пленками HfO_2, выращенными методом атомно-слоевого осаждения, и высоколегированными подложками Si(001) [6]. Мы измерили взаимное расположение зонной структуры $E(k)$ монокристаллических кремниевых подложек относительно верхнего слоя HfO_2, для интерфейсов HfO_2/p^+-Si и HfO_2/n^+-Si, и из полученных данных оценили изгиб зон в HfO_2 и Si. Мы выяснили не только роль легирования Si на межфазную зонную структуру, но и влияние (*in situ*) отжига образцов HfO_2/Si. Кроме того, мы определили влияние высокоинтенсивного мягкого рентгеновского излучения на локальные

электрические поля на границе раздела, что отражается во временной эволюции спектров основного уровня под облучением.

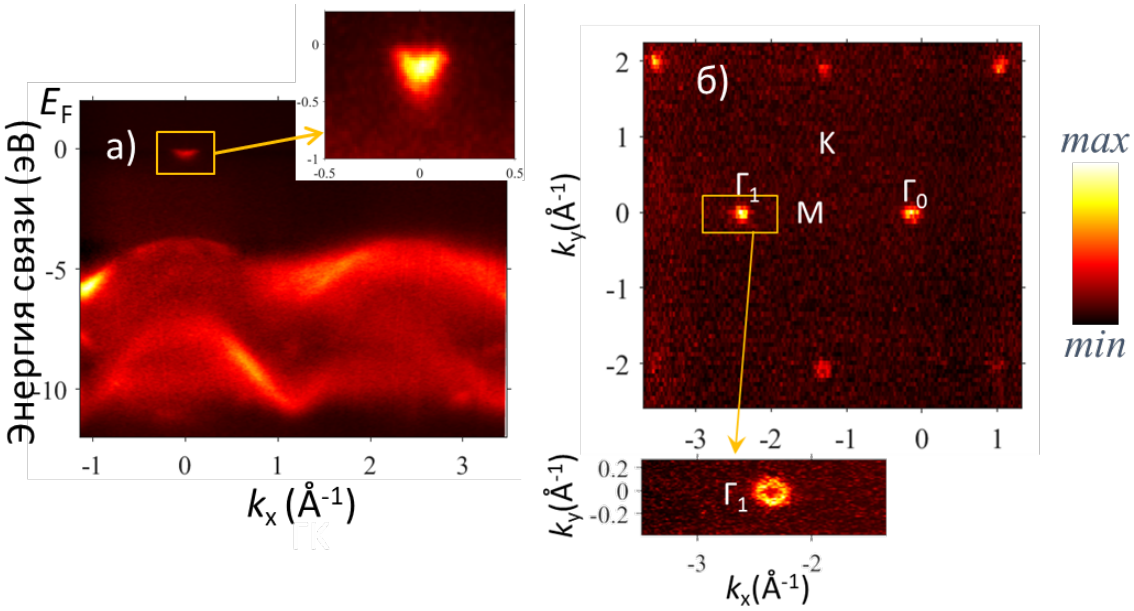


Рис. 1. а) Экспериментальная зонная структура 2DEG в AlGaN/GaN, измеренная при hv = 1066 эВ для направления ГМ объемной зоны Бриллюэна. б) Экспериментальная поверхность Ферми (ПФ) образованная 2DEG. ПФ выглядит как узкие электронные карманы, центрированные вокруг Г-точек, что соответствует положениям дна зоны проводимости.

Кроме того, методом SX-ARPES мы исследовали гетероэпитаксиальный структуры AlGaN/GaN – системы с двумерным электронным газом (2DEG), уже применяющиеся в современных высокочастотных электронных компонентах [4]. Мы получили изображения в *k*-пространстве фундаментальных характеристик электронной структуры — поверхности Ферми и зонной структуры, сформированных в ультратонком барьерном слое. Наши данные позволили выявить необычные особенности электронного спектра, недоступные для традиционных оптических и магнитотранспортных экспериментов.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (Договор 075-03-2025-662 от 17.01.2025, проект FSMG-2023-0006).

Литература:

[1] A. Damascelli, Z. Hussain, and Z. X. Shen // Angle-Resolved Photoemission Studies of the Cuprate Superconductors, Reviews of Modern Physics 75, 473 (2003).
[2] V. N. Strocov, L. L. Lev et al. // K-Resolved Electronic Structure of Buried Heterostructure and Impurity Systems by Soft-X-Ray ARPES, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 236, 1 (2019).
[3] L. L. Lev, D. V. Averyanov et al. // Band Structure of the EuO/Si Interface: Justification for Silicon Spintronics, Journal of Materials Chemistry C 5, 192 (2016).
[4] L. L. Lev, I. O. Maiboroda et al. // K-Space Imaging of Anisotropic 2D Electron Gas in GaN/GaAlN High-Electron-Mobility Transistor Heterostructures, Nature Communications 2018 9:1 9, 1 (2018).
[5] L. L. Lev, I. O. Maiboroda et al. // Impact of Band-Bending on the k-Resolved Electronic Structure of Si-Doped GaN, Physical Review Research 4, 13183 (2022).
[6] L. L. Lev, V. N. Strocov et al. //Band bending and k-resolved band offsets at the $HfO_2/n^+(p^+)Si$ interfaces explored with synchrotron-radiation ARPES/XPS. Phys. Rev. Materials 6, 084605.

СД-IV-31

Опыт и перспективы использования синхротронного излучения в исследованиях наночастиц и слоистых материалов по тематикам ИХХТ СО РАН

Лихацкий М.Н., Воробьев С.А., Томашевич Е.В.
Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск, Россия
lixmax@icct.ru

Синхротронное излучение (СИ) за счет превосходной яркости, возможности плавной регулировки энергии фотонов и особых поляризационных свойств фотонов позволяет получать исключительно широкий спектр информации об изучаемых объектах. Сотрудниками ИХХТ СО РАН накоплен уникальный опыт исследований наночастиц металлов (Cu, Ag, Au, Pt, Pd), их халькогенидов и композитов с типичными оксидными носителями на различных каналах синхротронных накопителей в России и зарубежом, включая структурные и гранулометрические исследования методами рентгеновской дифракции, в т.ч. малоугловое рентгеновское рассеяние (SAXS), рентгеновскую спектроскопию поглощения (XANES и EXAFS) для характеризации локального окружения и химического состояния атомов металлов, HAXPES для изучения концентрационных профилей элементов в приповерхностных металл-дефицитных слоях ряда сульфидов металлов в сочетании с TEY XANES и РФЭС. Целью доклада является обзор работ в ИХХТ СО РАН с применением СИ, главным образом, в группе проф. Ю.Л. Михлина, и перспектив изучения наноразмерных и 2D-материалов с применением СИ.

Отметим ряд избранных результатов. При восстановлении $HAuCl_4$ сульфидом натрия в водном растворе нуклеация частиц существенно заторможена, образованию наночастиц золота и/или Au_2S предшествует формирование ряда жидких интермедиатов. Поверхностные слои сформированного при комн. температуре аморфного Au_2S, как показано с помощью РФЭС, в СВВ-условиях и при облучении рентгеновским пучком разлагаются с образованием НЧ золота и полисульфид-ионов. Подгонки спектров СИ EXAFS, напротив, показали присутствие в первой координационной сфере Au атомов серы, хотя, и на расстояниях несколько больших (2,31 Å), чем в фазовом сульфиде [1].

Исследование аморфизованных металл-дефицитных поверхностных слоев на ряде сульфидных минералов методом СИ HAXPES (HZB BESSYII, Германия, г. Берлин) продемонстрировало, что слои сильно стратифицированы и простираются вглубь материала на несколько десятков, а не на единицы нанометров, как считалось ранее; дефектный (глубинный) слой модели может иметь толщину сотни нм.

В последнее время наш исследовательский интерес сфокусирован на группе смешанослойных материалов, природные прототипы которых – минералы группы валлериита – состоят из чередующихся 2D-слоев сульфидов 3d-металлов (Fe, Cu, Ni, W, V) с бруситоподобными слоями переменного состава. В связи с тем, что синтетические материалы со структурами валлериита [2], точилинита [3] и «медистого» валлериита [4] (последний синтезирован нами впервые, не имеет природного аналога), кристаллизующиеся в форме нанохлопьев, в ходе поисковых экспериментов продемонстрировали интересные оптические,

фотокаталитические, электронные, электрохимические, магнитные и фотогальванические свойства, отличную от фазовых сульфидов реакционную способность [5], имеются основания предложить такие материалы как основу синтетической платформы для получения новых полупроводников с регулируемыми свойствами путем легирования/замещения для широкого круга потенциальных приложений. Насколько нам известно, до появления наших работ валлериты, включая минеральные образцы, методами рентгеновской спектроскопии поглощения не изучались, а структура, способы управления составом слоев и природа стабилизации 3D-структуры оставались неясными. Из спектров XANES природных образцов валлериита, измеренных вблизи K-краев Fe и Cu на станции канала BM23 ESRF (Гренобль, Франция), Cu находится в состоянии Cu^{+}, железо присутствует в форме Fe^{3+}; обнаруживается гораздо большее сходство с халькопиритом, чем с борнитом, хотя по сравнению с халькопиритом, как следует из результатов подгонки спектров EXAFS, имеют место значительные искажения координационного тетраэдра в первой координационной сфере металлов в сульфидных слоях, а таже присутствует значительное количество кислорода в координации с Fe^{3+} в гидроксидных слоях [6].

Спектры рентгеновского поглощения от ряда синтетических валлериитов и точилинитов получены на EXAFS-станции накопителя ВЭПП-3 ЦКП СЦСТИ (ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск. Из сравнения спектров XANES со спектрами типичных сульфидных и оксидных соединениями железа следует, что положение предкраевого пика, относимого переходу электронов K-оболочки Fe в вакантную (4p+3d)-зону, ближе к спектру пирротина, а его интенсивность сопоставима с таковой в спектре гематита; последнее подразумевает пониженный локальный положительный заряд на атомах Fe, который имеет значение для стабилизации структуры. Найденные при подгонке отличные от идеальных координационные числа металл-металл могут подразумевать кластеризацию, которая может проливать свет на возникновение у материалов магнитноупорядоченных состояний. Представляется перспективным продолжение исследований локального окружения и химического состояния атомов у синтетических валлериитов точилинитов и «медистых» валлериитов методами EXAFS и XANES, особенностей структуры с помощью СИ РФА, особенностей электронного строения, в т.ч. валентной зоны, с помощью ARPES и РФЭС, в рамках более глобальной задачи поиска связей «состав-структура-свойство» для развития данной материаловедческой платформы.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой проекта Минобрнауки № FWES-2021-0014.

Литература:

[1] Mikhlin Yu., Likhatski M., Tomashevich Ye. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **2010**, *177(1)*, 24-29.
[2] Mikhlin Yu.L., Borisov R.V., Vorobyev S.A. et al. // *J. Mater. Chem. A* **2022**, *10*, 9621–9634.
[3] Mikhlin Yu.L., Borisov R.V., Likhatski M.N. et al. // *New J. Chem.* **2023**, *47*, 11869–11881.
[4] Likhatski M.N., Borisov R.V., Karpov D.V. et al. // *Nanoscale.* **2024**, *16*, 22360.
[5] Likhatski M.N., Borisov R.V., Fetisova, O.Yu. // *ACS Omega*. **2023**, *8(39)*, 36109-36117.
[6] Mikhlin Yu.L., Likhatski M.N., Bayukov O.A. et al. // *ACS Omega* **2021**, *6*, 7533–7543.

СД-IV-32

Компактные установки импульсного лазерного осаждения для in situ экспериментов на синхротронных и нейтронных источниках

Максимова К.Ю., Грунин А., Киричук Г.В., Швец П.В., Гойхман А.И.
НОЦ «Функциональные наноматериалы», Балтийский федеральный университет, Калининград, Россия
xmaksimova@gmail.com

Импульсное лазерное осаждение (ИЛО, PLD) остаётся одним из наиболее гибких методов синтеза оксидных плёнок и гетероструктур: импульсный режим обеспечивает близкую к стехиометрической переносимость состава с мишени на подложку, допускает быстрые изменения параметров (энергия, частота, атмосфера, температура) и хорошо сочетается с небольшими вакуумными объёмами. Для исследований на источниках синхротронного и нейтронного излучения (СИ, НИ) критической становится компактность: камера должна быть лёгкой, геометрически адаптирована к станции. Наконец, in situ-диагностика непосредственно во время роста позволяет избегать артефактов переноса образцов (адсорбция, релаксация, окисление, влияние защитных слоев), а главное — устанавливать причинно-следственную связь между режимами роста и эволюцией структуры, напряжений и доменной архитектуры плёнок в реальном времени. Для реализации этой связки нами разработана компактная PLD-камера, оптимизированная под синхротронные линии, а также рассмотрены решения для нейтронной рефлектометрии.

Установки могут быть выполнены в двух компоновках: (1) лёгкие компактные камеры для прямой установки на сам инструмент (магниты/подвес гониометра), упрощает интеграцию; (2) отдельные полноразмерные ростовые станции с вакуумным переносом образца через загрузочную мини-камеру («baby-chamber») на измерительную позицию без разгерметизации. Первая компоновка позволяет проводить in situ эксперименты; вторая оптимальна для экспериментов in vacuo, где отсутствует возможность интеграции дополнительного нового оборудования станции СИ.

Демонстрация работоспособности выполнена на линии P23 PETRA III (DESY) при росте $BaTiO_3$ (BTO) на $LaAlO_3$(001), $SrTiO_3$(001), $GdScO_3$(110) и MgO(001). Использовали Nd:YAG 266 нм, 10 Гц, 6–7 нс, 32 мДж; T_s = 500 °C; расстояние мишень–подложка 5 см; $p(O_2) = 1{,}5\times10^{-2}$ мбар. Измерения проводили при 23 кэВ (λ≈0,54 Å), отслеживая отражения (001)/(002). Пошаговая схема роста с фиксированным числом импульсов позволила регистрировать смещение и эволюцию интенсивностей брэгговских максимумов уже на толщинах < 3 нм, что указывает на сильное напряжённое состояние зародышей. При дальнейшем наращивании до ~20 нм наблюдается релаксация и формирование доменной структуры на $LaAlO_3$ и $SrTiO_3$; для MgO релаксация проявляется уже на ранних этапах из-за большого рассогласования решёток (~9,2 %), и плёнка растёт монодоменно. Этот эксперимент демонстрирует, что компактная камера обеспечивает стабильный рост и полноценную in situ структурную диагностику в реальном времени, необходимую для управляемого конструирования плёночной архитектуры.

Параллельно на нейтронном источнике был проведен похожий эксперимент: компактная PLD-камера, непосредственно интегрированна в поляризованный нейтронный рефлектометр SuperADAM (ILL), продемонстрировала in situ PNR-измерения по мере роста/термообработки магнитных слоев и одиночных плёнок (включая CoFeB/Mo), что открывает доступ к динамике изменения магнитных свойств и определению взаимодействия в процессе синтеза.

В совокупности компактные PLD-системы позволяют проводить фундаментальные исследование роста тонких пленок, сокращая неопределённости и ускоряя подбор режимов формирования сложных структур. Результаты на PETRA III для $BaTiO_3$ демонстрируют разрешающую способность in situ дифракции к раннему зарождению и релаксации, а опыт на SuperADAM иллюстрирует потенциал in situ PNR для выявления эволюции магнитных свойств в процессе осаждения/отжига. Дальнейшее развитие подобных установок на станциях

Благодарности: исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Номер гранта FZWM-2024-0011

Литература:

[1] Koster G. и др. // Rev. Mod. Phys. 2012. Т.84. С. 253–298.
[2] Schlom D.G. и др. // MRS Bulletin. 2008. Т.33. С. 1017–1025.
[3] Kirichuk G. и др. // Vacuum. 2025. В печати.
[4] Kirichuk G. и др. // arXiv:2501.08108. 2025.
[5] Отчёт по эксперименту PETRA III P23 ($BaTiO_3$, in situ PLD) // DESY. 2023.
[6] SuperADAM — описание инструмента // ILL. 2025.

СД-IV-33

Железосодержащие фосфаты со структурой α-$CrPO_4$ как катодные материалы для натрий-ионных аккумуляторов

Мацаев Б.А., Лучинин Н.Д., Федотов С.С.
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
bulat.matsaev@skoltech.ru

На текущий момент большой интерес вызывают комплементарные литий-ионным аккумуляторам (ЛИА) системы хранения энергии, среди которых – натрий-ионные аккумуляторы (НИА), примечательные сходством механизмов и технологии с ЛИА, а также предполагаемой экономической доступностью и структурной вариативностью с точки зрения электродных материалов.

В данной работе будет представлен новый класс железосодержащих фосфатов α-$Na_xFe_{1-y}Cr_yPO_4$ ($0 \le x \le 0.75$, $y \le 0.25$), изотипных α-$CrPO_4$ [1] и позиционируемых в качестве катодных материалов для ЛИА или НИА. Для получения материала был оптимизирован многостадийный метод, включающий гидротермальный синтез специального прекурсора $NH_4Fe_{1-y}Cr_yPO_4F$ с кристаллической структурой $KTiOPO_4$ (KTP) с последующим термическим разложением для стабилизации α-$CrPO_4$-модификации [2]. Для применения материала в качестве катодного материала для НИА дополнительной стадией проводился твердофазный синтез для внедрения катионов натрия.

По данным рентгеновской дифракции соединения α-$Na_{0.5}Fe_{0.75}Cr_{0.25}PO_4$/C и α-$Fe_{0.75}Cr_{0.25}PO_4$/C изоструктурны α-$CrPO_4$, с наличием в трехмерном каркасе протяженных каналов вдоль направлений [010] и [100]. Химический состав подтвержден методами Мессбауэровской, энергодисперсионной и инфракрасной спектроскопии. Морфология частиц исследована с помощью сканирующей электронной микроскопии. Измерение электрохимической активности углеродсодержащего композитов α-$Fe_{0.75}Cr_{0.25}PO_4$/C в литиевой системе и α-$Na_{0.5}Fe_{0.75}Cr_{0.25}PO_4$/C в натриевой проводили методом гальваностатического циклирования и циклической вольтамперометрии в диапазоне потенциалов 1.8–4.3 В отн. Li^+/Li и 2.0–4.2 В отн. Na^+/Na соответственно. В качестве электролитов использовали растворы 1M $LiPF_6$ в EC:DEC (1:1 об.) и 1M $NaPF_6$ в EC:DEC (1:1 об.) + 2% FEC соответственно. Показано, что материал α-$Fe_{0.75}Cr_{0.25}PO_4$/C обладает обратимой электрохимической активностью с достижением среднего рабочего потенциала 3.2 В отн. Li^+/Li и удельной разрядной емкостью 88 мАч/г при скорости циклирования C/10. В свою очередь, α-$Na_{0.5}Fe_{0.75}Cr_{0.25}PO_4$/C демонстрирует средний рабочий потенциал 3.1 В отн. Na^+/Na с удельной разрядной емкостью 108 мАч/г при C/10.

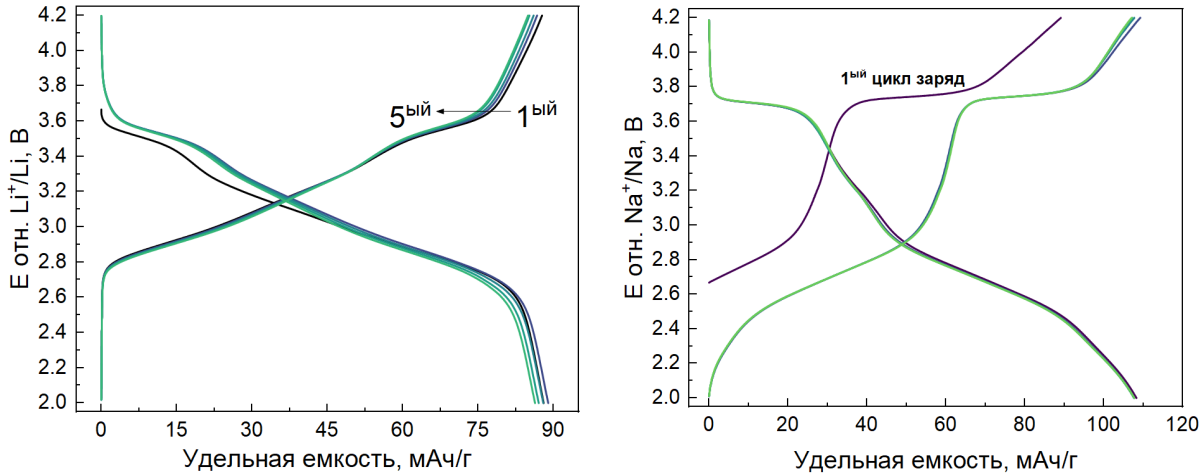


Рис. 1. Кривые гальваностатического циклирования α-$Fe_{0.75}Cr_{0.25}PO_4$/C против металлического лития – слева и α-$Na_{0.5}Fe_{0.75}Cr_{0.25}PO_4$/C против металлического натрия – справа, при скорости тока C/10.

В докладе будут подробно рассмотрены особенности синтеза химического состава и кристаллической структуры α-$Na_xFe_{1-y}Cr_yPO_4$, а также их взаимосвязь с электрохимическими свойствами.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант 23-73-10125.

Литература:

[1] Attfield, J. P., Sleight, A. W., & Cheetham, A. K., 1986, Nature. **322**. 620–622.
[2] Bazan B., Mesa J. L., et al., 2004, Chem. Mater. **16**. 5249-5259.

СД-IV-34

Применение методов рентгеновской спектроскопии с использованием СИ для исследования электронной структуры твёрдых растворов $Zr_xTi_{1-x}Ch_2$ (Ch = S, Se)

Меренцов А.И.[1], Шкварин А.С.[1], Кузнецова А.Ю.[1], Королёва А.В.[2], Жижин Е.В.[2], Чумаков Р.Г.[3], Титов А.Н.[1]

1 – Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
2 – Научно-исследовательский парк СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия
3 – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
Alexander.Merentsov@urfu.ru

Твёрдые растворы замещения на основе слоистых дихалькогенидов переходных металлов TCh_2 (T – 3,4d-переходный металл, Ch = S, Se, Te) являются перспективными материалами для литий-ионных батарей [1,2]. Характерной особенностью таких твёрдых растворов является гетерогенная морфология монокристаллов, при которой в пределах одного кристалла образуются области (структурные фрагменты), обладающие различной электронной структурой [3-6]. Устойчивость подобного рода морфологии обеспечивается за счёт переноса заряда между структурными фрагментами. В частности, в соединениях $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ был обнаружен перенос заряда $ZrSe_2$ → $TiSe_2$ [6]. Система $Zr_xTi_{1-x}S_2$ синтезирована, с одной стороны, для использования в качестве электродного материала в Li-ионной ячейке [2]. С другой стороны, сравнение электронной структуры систем $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ и $Zr_xTi_{1-x}S_2$ позволит определить роль халькогена в формировании электронной структуры и морфологии монокристаллов с одинаковы отношением концентраций Zr/Ti.

Рентгеновская спектроскопия с использованием источников синхротронного излучения является прямой методикой исследования электронной структуры слоистых кристаллов. Возможность варьирования энергии падающего излучения позволяет, в отличие от лабораторных источников, использовать методику рентгеновской резонансной фотоэлектронной спектроскопии (ResPES). Для более точного выбора энергий резонансного возбуждения снимается спектр рентгеновского поглощения на соответствующем краю (L или M). Реализованная в синхротронных центрах (ANTARES и HERMES @SOLEIL, ESCA Microscopy @ELETTRA) методика рентгеновской фотоэлектронной микроскопии (SPEM, X-PEEM) позволяет получить информацию о локальной электронной структуре субмикронных областей монокристаллов. Для исследования зонной структуры в прифермиевской области используется методика рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES), реализуемая как на лабораторных источниках (установка НАНОЛАБ РЦ «Физические методы исследования поверхности СПбГУ), так и в синхротронных центрах (VUV @ ELETTRA, ANTARES @ SOLEIL).

Рентгеновские фотоэлектронные спектры (XPS) исследуемых в работе кристаллов системы $Zr_xTi_{1-x}S_2$ были получены на лабораторном фотоэлектронном спектрометре Escalab 250Xi (Thermo Fisher Scientific), оснащенном источником монохроматического излучения $Al_{K\alpha}$ (энергия фотонов 1486,6 эВ) в Ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Санкт-Петербургского университета. Спектры рентгеновского поглощения (XAS) и спектры валентных полос в режиме резонансного возбуждения (ResPES) измерялись на

экспериментальной станции НаноФЭС Курчатовского источника синхротронного излучения (НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва). ARPES и SPEM изображения кристалла $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$ получены на экспериментальной станции ANTARES синхротрона SOLEIL (Франция) при энергии возбуждения 95 эВ.

На картинах SPEM области 300 × 300 мкм кристалла $Zr_{0.25}Ti_{0.75}Se_2$ хорошо видны области с различающейся электронной структурой. Низкотемпературные измерения ARPES позволили различить области на основе $ZrSe_2$ и $TiSe_2$. При этом на всех спектрах Se 3d в системе $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ присутствует исключительно один дублет. Такая картина значительно отличается от наблюдаемых ранее двух дублетах Se 3d в системе $Cr_xTi_{1-x}Se_2$ [3] и $V_xTi_{1-x}Se_2$ [5]. Возможно, это связано с близостью энергии связи Se 3d в $ZrSe_2$ и $TiSe_2$. В системе $Zr_xTi_{1-x}S_2$ наблюдается постепенный сдвиг энергий связи внутренних уровней всех компонентов при увеличении содержания Zr. Скорость роста энергий связи при этом различается: она максимальная для Zr 3d и минимальная для S 2p. Аналогичная картина наблюдалась и в системе $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ [6]. Изменение относительной интенсивности пиков спектра поглощения Ti L_3 вместе с наблюдаемым выраженным резонансным пиком вблизи уровня Ферми на спектрах валентной полосы, полученных в режиме возбуждения, соответствующему Ti 2p-3d переходу, позволяет сделать вывод о направлении переноса заряда $ZrS_2 \rightarrow TiS_2$. Наблюдаемые два состояния серы на спектрах S 2p в кристалле $Zr_{0.5}Ti_{0.5}S_2$ позволяют сделать вывод о том, что тип халькогена не влияет на сам факт наличия структурных фрагментов и направление переноса заряда, но влияет на их химический состав. Аналогичное поведение ранее наблюдалось в системах $Cr_xTi_{1-x}Ch_2$ (Ch = S, Se) [3].

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и правительства Свердловской области (проект РНФ № 24-23-20136, соглашение 9-25-МГ).

Литература:

[1] G. Barik and S.Pal // J. Phys. Chem. C. 2018. 122. 45. 25837–25848.
[2] A. Yu. Kuznetsova, E.A. Suslov, and A.N. Titov // J. Chem. Phys. 2024. 160. 211103(1-5)
[3] A.I. Merentsov, A.S. Shkvarin, M. S. Postnikov, L. Gregoratti, M. Amati, P. Zeller, P. Moras, A.N. Titov // J. Phys. Chem. Solids. 2022. 160. 110309.
[4] A.N. Titov, A.S. Shkvarin, A.I. Merentsov, O. V. Bushkova, E.A. Suslov, A.A. Titov, J. Avila, M.C. Asensio, N. V. Kazantseva, M.S. Postnikov // Chem. Mater. 2021. 33. 8915–8925.
[5] A.S. Shkvarin, A.I. Merentsov, M.S. Postnikov, Y.M. Yarmoshenko, E.G. Shkvarina, E.A. Suslov, A.Y. Kuznetsova, I. Píš, S. Nappini, F. Bondino, P. Moras, P.M. Sheverdyaeva, E. Betz-Guttner, A.N. Titov // J. Phys. Chem. C. 2022. 126. 7076–7085.
[6] A.I. Merentsov, I. Píš, A.S. Shkvarin, M.S. Postnikov, Y.M. Yarmoshenko, E.G. Shkvarina, A.A. Titov, A.O. Onischenko, A.N. Titov // J. Chem. Phys. 2025. 162. 044704.

СД-IV-35

Азопроизводные лигнина как современные полимеры для медицины, защиты окружающей среды и функциональных материалов

Михейкина А.А.[1,2], Голубков В.А.[1,2], Маляр Ю.Н.[1,2], Таран О.П.[1,2]
1 – Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск, Россия
2 – Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
miheikina.anna@yandex.ru

Современные экологические тенденции направлены на снижение негативного воздействия на окружающую среду путем использования отходов сельского хозяйства и лесопереработки в качестве сырья [1]. Один из основных компонентов растительного сырья – лигнин, являясь полимером фенольной природы, способен выступать в качестве азосоставляющей в реакции азосочетания. Такой процесс модификации лигнина потенциально может быть использован для получения красителей, УФ-фильтров, сорбентов, антиоксидантов. Азолигнины способны к обратимым структурным изменениям (stimuli-response) под действием температуры, светового излучения (фотоизомеризация) и pH среды, что открывает перспективы для их высокотехнологичного применения [2,3].

Новые производные этаноллигнина сосны получены путём реакции азосочетания с диазониевыми солями аминобензойных кислот. Использовались как «прямой», так и «обратный» методы диазотирования аминов. На основании элементного состава и представлений о структуре лигнина определена степень замещения: на 3 фенилпропановых единицы приходится 1 азогруппа, что соответствует теоретическому максимуму. Групповой состав и структура азопроизводных исследованы методами ИК-спектроскопии, ^{13}C и ^{1}H ЯМР-спектроскопии, молекулярно-массовые характеристики определены методом гель-проникающей хроматографии.

Полученные азопроизводные лигнина обладают высокой антиоксидантной активностью, что подтверждено по взаимодействию с модельным стабильным радикалом - дифенилпикрилгидразилом (ДФПГ) [5]. Исходный лигнин эффективно поглощает ДФПГ радикалы, незначительно уступая витамину С. Модификация незначительно влияет на активность. Наиболее высокую антиоксидантную активность показал образец лигнина, модифицированный прямым методом 2-аминобензойной кислотой (рис. 1).

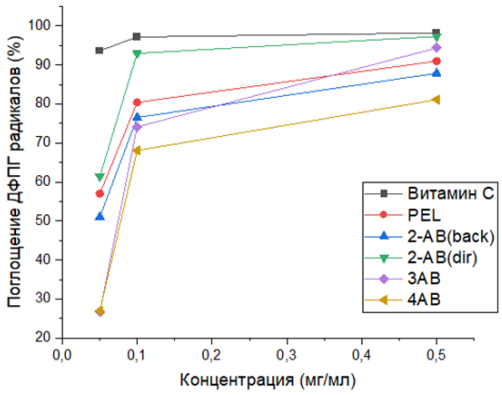


Рис. 1. Концентрационная зависимость поглощения ДФПГ радикалов этаноллигнином сосны и его азопроизводными

Поскольку азолигнины содержат сопряжённые двойные связи N=N, в результате изомеризации, в том числе фотоиндуцированной, они могут образовывать два геометрических изомера [2]. Методом электронной спектроскопии установлено, что образец азолигнина, синтезированный прямым методом диазотирования с 2-аминобензойной кислотой при облучении видимым светом претерпевает переход из транс- в цис-форму (рис. 2). Азопроизводные лигнина с 3-аминобензойной кислотой и 4-аминобензойной кислотой, не фотоизомеризуются, что указывает на влияние положения заместителя. Кроме того, при облучении образцов наблюдается снижение оптической плотности, что может быть связано с фотолизом.

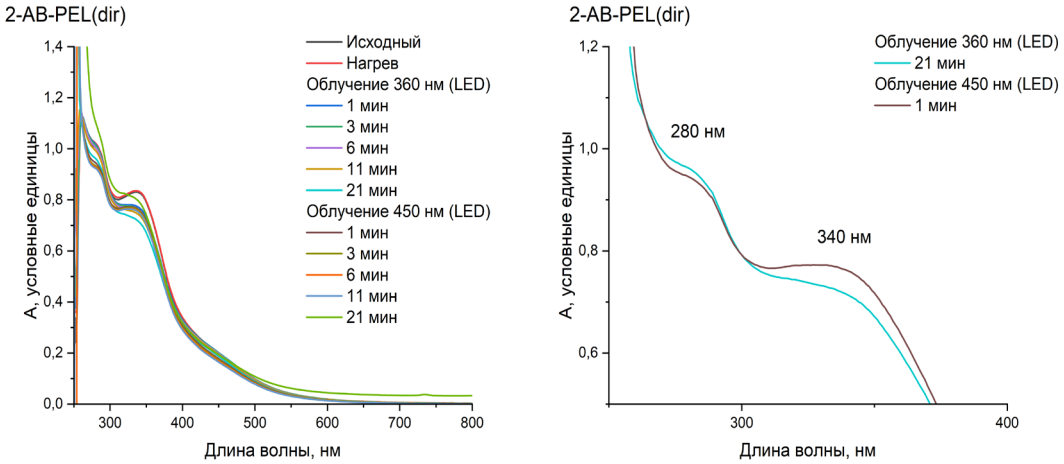


Рис. 2. Электронные спектры поглощения поглощения азопроизводных этаноллигнина

Способность азолигнинов к обратимым структурным изменениям перспективна для их использования в системах доставки лекарств. Благодаря наличию массивного углеводородного скелета, сложенного фенилпропановыми единицами, и ионогенных центров (COO^-, SO_3^-) водорастворимые азопроизводные лигнина могут использоваться в качестве ПАВ для подавлению угольной пыли в воздухе.

Для дальнейшего изучения свойств азопроизводных лигнина, их структуры и конформационных состояний в растворах необходимо использование современных методов анализа с применением синхротронного излучения.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (проект №FWES-2021-0012).

Литература:

[1] Patel B., Patel A., Gami B., Patel P. // Renewable Energy. Elsevier. 2020. Vol. 148, № 6. P. 816-823.
[2] Golubkov, V. A. Vasilieva N. Y., Malyar Y. N. // Wood Science and Technology. 2024. Т. 58. № 5. P. 1861-1879
[3] Borovkova, V.S., Malyar Y. N. , Vasilieva N. Y., Skripnikov A.M., . Ionin V.A., Sychev V.V., Golubkov, V. A., Taran O.P. // Materials. 2023. Vol. 16. № 4. 1525 p.

СД-IV-36

Исследование дефектной структуры катализатора $NiO-SiO_2$

Михненко М.Д.[1,2], Черепанова С.В.[2], Пахарукова В.П.[2], Булавченко О.А.[1,2]
1 – ЦКП «СКИФ», Новосибирск, Россия
2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
m.mikhnenko@catalysis.ru

В настоящее время катализаторы на основе Ni широко используются в различных химических реакциях. К таким реакциям относятся переработка нефти, повышение качества биотоплива, синтез-газ, паровой риформинг или разложение CH_4 и NH_3. Для улучшения текстурных и каталитических свойств используются различные добавки. Эти добавки также влияют на фазовый состав и структуру катализатора. Было показано, что модифицированные Si катализаторы на основе Ni имеют высокую площадь поверхности и малый размер частиц [1,2].

В ходе данной работы структурные особенности $NiO-SiO_2$ были исследованы с помощью in situ XRD, дифракционного моделирования моделей одномерных неупорядоченных кристаллов и моделирования PDF. Были использованы следующие модели PDF: 1) чистый NiO; 2) NiO и шпинель Ni_2SiO_4; NiO с Si, внедренным в тетраэдрические позиции структуры. С помощью одномерных неупорядоченных структур было показано, что происходит включение тетраэдрических слоев SiO_2. С повышением температуры прокаливания эти слои распадаются с образованием отдельных тетраэдров SiO_4 внутри структуры NiO и выходом избыточного SiO_2 на поверхность. При 900°C образец становится состоящим из двух частей: дефектного NiO с внедрённым SiO_2 и чистого NiO, что было показано методом рентгеновской дифракции. После отжига при 1100°C образец состоит из NiO, без фазы с внедрённым Si, и следами фазы Ni_2SiO_4. При этом размеры ОКР образца резко увеличиваются с 25 Å до более чем 300 Å.

Литература:

[1] Bykova M. V. et al. Ni-based sol–gel catalysts as promising systems for crude bio-oil upgrading: Guaiacol hydrodeoxygenation study //Applied Catalysis B: Environmental. 2012. Т. 113. С. 296-307.
[2] Bykova M. V. et al. Guaiacol hydrodeoxygenation in the presence of Ni-containing catalysts //Catalysis in industry. 2011. Т. 3. С. 15-22.

СД-IV-37

Использование синхротронного излучения для анализа пористых металл-органических супрамолекулярных «клеток» и материалов на их основе

Овсянников А.С.[1,2], Соловьёва С.Е.[1,2], Антипин И.С.[1,2]
1 – Казанский федеральный университет, Казань, Россия
2 – Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия
osaalex2007@rambler.ru

Дизайн дискретных пористых металл-органических или координационных супрамолекулярных «клеток» является одной из бурно развивающихся направлений современной химии, позволяющих получать новые материалы с настраиваемыми свойствами. В зависимости от природы входящих в их состав компонентов (органических линкеров и катионов металлов) можно целенаправленно создавать металл-органические супрамолекулярные «клетки» с заданным размером и характером пор, что позволяет их применять в различных областях, в частности, в разделении, хранении молекул, селективной адсорбции, адресной доставки лекарственных препаратов в биологическую клетку, в (фото)катализе, разработке сенсорных устройств и прочее. В докладе будут представлены последние мировые достижения, а также результаты, полученные нашей научной группой в области дизайна и применения металл-органических супрамолекулярных «клеток», что стало возможным, благодаря использованию синхротронного излучения.

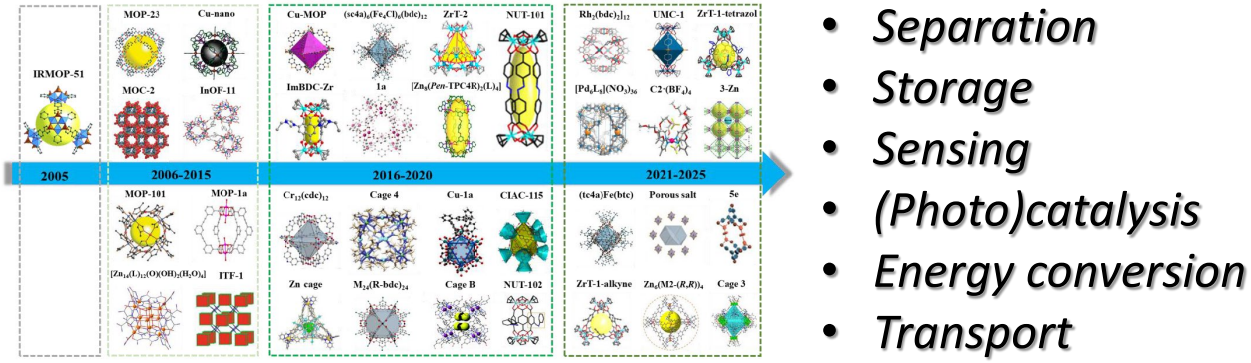


Рис. 1. Развитие координационных «клеток» и их применение.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 19-73-20035.

Литература:

[1] Li W., Wang L., Keshta B. E., Bi Y., Zhang Y., Chen B. // Coord. Chem. Rev., 2025, V. 545, P. 217032.
[2] Gosselin A. J., Rowland C. A., Bloch E. D. // Chem. Rev., 2020, V. 120, P. 8987–9014.
[3] Khariushin I. V., Bulach V., Solovieva S. E., Antipin I. S., Ovsyannikov A. S., Ferlay S. // *Coord. Chem. Rev.*, 2024, V. 513, P. 215846.
[4] Khariushin I. V., Ovsyannikov A. S., Baudron S. A., Ward J. S., Kiesilä A., Rissanen K., Kalenius E., Kovalenko K. A., Fedin V. P., Solovieva S. E., Antipin I. S., Bulach V., Ferlay S. // *Chem. Commun*. 2022, V. 58, P. 13628.
[6] Khariushin I. V., Ovsyannikov A. S., Baudron S. A., Ward J. S., Kiesilä A., Rissanen K., Kalenius E., Chessé M., Nowicka B., Solovieva S. E., Antipin I. S., Bulach V., Ferlay S. // *Nanoscale*, 2025, V. 17, P. 1980-1989.
[7] Kniazeva M. V., Ovsyannikov A. S., Nowicka B., Kyritsakas N., Samigullina A. I., Gubaidullin A. T., Islamov D. R., Dorovatovskii P. V., Popova E. V., Kleshnina S. R., Solovieva S. E., Antipin I. S., Ferlay S. // *CrystEngComm*, 2022, V. 24, P. 330–340.

СД-IV-38

Электронные взаимодействия в заполненных углеродных нанотрубках по данным рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии

Окотруб А.В., Семушкина Г.И., Ворфоломеева А.А., Седельникова О.В., Булушева Л.Г.
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия
spectrum@niic.nsc.ru

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ), обладающие замкнутым внутренним пространством, защищенным химически стойкими оболочками, могут быть заполнены разными типами неорганических соединений, что приводит к изменениям электронного состояния их поверхности и позволяет регулировать положение уровня Ферми. Соединения внутри нанотрубок ограничены стенками ОУНТ и могут находиться в нестандартных химических состояниях, что само по себе представляет интерес для систематических исследований.

В работе мы использовали ОУНТ производства компании ОКСИАЛ заполненные серой, фосфором, селеном, мышьяком и их соединениями. Морфология ОУНТ и химическое состояние углеродных стенок и внутренних компонент были проанализированы с помощью методов просвечивающей электронной микроскопии, комбинационного рассеяния, термогравиметрического анализа, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии тонкой структуры ближнего рентгеновского поглощения и рентгеновской флуоресценции высокого разрешения. Экспериментально продемонстрированы донорно-акцепторные взаимодействия между инкапсулированными серой, фосфором и ОУНТ.

Впервые измерены рентгеновские эмиссионные Kα- и Kβ-спектры серы и фосфора, инкапсулированных в однослойные углеродные нанотрубки. Полученные спектры сравнивались со спектрами их объемных аналогов, а именно пластической серы и красного фосфора. Были построены модели цепочек серы и фосфора как в свободном состоянии, так и при их инкапсуляции в нанотрубки. Для анализа распределения электронной плотности 3p-зарядов в валентной зоне были проведены квантово-химические расчеты. Обнаружена сильная корреляция между положением теоретических полос и формой экспериментальных Kβ-спектров. Сравнивая спектры свободной и инкапсулированной серы и фосфора, мы проанализировали их электронные взаимодействия со стенками углеродных нанотрубок.

СД-IV-39

Адсорбционно-индуцированная сегрегация как инструмент управления составом поверхности модельных биметаллических Pd-Co/ВОПГ катализаторов

Панафидин М.А.[1], Бухтияров А.В.[1], Мартьянов А.О.[1], Федоров А.Ю.[1], Просвирин И.П.[2], Бухтияров В.И.[2]

1 – ЦКП «СКИФ», Институт катализа СО РАН, Кольцово, Россия

2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

mpanafidin@catalysis.ru

В настоящее время биметаллические катализаторы привлекают внимание различных исследователей, работающих как в прикладном, так и в фундаментальном направлении науки, особенно в области гетерогенного катализа. Это обусловлено тем, что зачастую катализаторы на основе биметаллических систем демонстрируют более высокую активность, селективность и/или стабильность по сравнению с монометаллическими катализаторами в целом ряде промышленно важных каталитических процессов. В частности, биметаллические Pd-Co катализаторы являются перспективными для использования в таких реакциях как окисление CO, восстановление нитрогрупп до аминогрупп, реакции кросс-сочетания, селективное гидрирование C≡C связи, в том числе гидрирование ацетилена в этилен и др. Известно, что введение второго металла в состав монометаллического катализатора приводит к образованию специфических активных центров биметаллических наночастиц на поверхности (геометрический эффект) и/или изменению электронных свойств первого металла (электронный эффект). Таким образом, прослеживается корреляция между структурой поверхности активного компонента и каталитическими характеристиками.

Химический состав, а также структура активных центров исходного (свежеприготовленного) биметаллического катализатора могут существенно изменяться как в ходе протекания реакции, так и в результате проведения постсинтетических предактивационных обработок катализатора в различных газовых средах (CO, O_2 и др.). Явление, при котором происходит обогащение поверхности биметаллической наночастицы одним из компонентов под действием газа-адсорбата, называется адсорбционно-индуцированной сегрегацией. Было показано, что такое явление может быть эффективно использовано для целенаправленной модификации поверхности биметаллического катализатора с целью создания активных центров нужного типа, обеспечивающих желаемый баланс между активностью и селективностью в реакциях селективного гидрирования. В частности, к настоящему времени проведено детальное исследование, результаты которого позволили сформулировать некоторые рекомендации по тонкой настройке поверхности Pd-Au и Pd-Ag катализаторов, представляющих собой системы на основе твердых растворов замещения, с помощью монооксида углерода, или Pd-In катализаторов, для которых характерно образование интерметаллических соединений, с помощью кислорода [1, 2]. Что касается Pd-Co систем, относящихся к катализаторам на основе твердых растворов замещения, то в настоящее время имеется лишь несколько работ [3, 4], в которых адсорбционно-индуцированная сегрегация рассматривается в качестве инструмента для

постсинтетической трансформации поверхности. Однако, имеющиеся в литературе данные являются разрозненными и недостаточными для того, чтобы адсорбционно-индуцированная сегрегация могла быть эффективно использована для управления структурой активных центров и каталитическими свойствами биметаллических Pd-Co катализаторов. Для этого требуется проведение систематического исследования с применением поверхностно-чувствительных физико-химических методов. Использование в качестве объектов исследования модельных систем, представляющих собой нанесенные на планарный проводящий носитель (например, на высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ)) наночастицы активного компонента, совместно с проведением экспериментов в режимах *in situ*/*operando* может существенно повысить информативность данных о структуре поверхности и химическом состоянии активного компонента в зависимости от условий протекания реакции или предварительных обработок [5].

В данной работе были исследованы закономерности формирования биметаллических Pd‑Co наночастиц, нанесенных на ВОПГ, методами сканирующей туннельной микроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Установлено, что напыление кобальта на монометаллический образец Pd/ВОПГ приводит к формированию биметаллических наночастиц со структурой $Pd_{ядро}$‑$Co_{оболочка}$, которые в результате прогрева образцов при температурах 400‑500°C в условиях сверхвысокого вакуума трансформируются в сплавные Pd‑Co наночастицы с равномерным распределением металлов. Прогрев образцов Pd‑Co/ВОПГ в вакууме при температурах выше 500°C ведет к спеканию наночастиц. Показано, что адсорбционно-индуцированная сегрегация атомов палладия на поверхность биметаллических наночастиц происходит в результате обработки модельного катализатора Pd‑Co/ВОПГ в среде монооксида углерода в диапазоне температур 25–250°C, при этом наблюдается колоколообразная зависимость с максимумом при 200°C. Показано, что биметаллические Pd‑Co-наночастицы в модельном катализаторе устойчивы к спеканию в атмосфере CO вплоть до 250°C.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП “СКИФ” ФГБУН ФИЦ Институт катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

Литература:

[1] Бухтияров А.В., Панафидин М.А., Просвирин И.П., Зубавичус Я.В., Стахеев А.Ю., Машковский И.С., Бухтияров В.И. // Успехи химии. 2025. Т.94 (1). № RCR5148.
[2] Машковский И.С., Марков П.В., Рассолов А.В., Патиль Е.Д., Стахеев А.Ю. // Успехи химии. 2023. Т.92(8). № RCR5087.
[3] Wu C.H., Liu C., Su D., Xin H.L., Fang H.T., Eren B., Zhang S., Murray C.B., Salmeron M.B. // Nat. Catal. 2018. V.2. P.78–85.
[4] Ma R., Yang T., Sun J., He Y., Feng J., Miller J.T., Li D. // Chem. Eng. Sci. 2019. V.210. P.115216.
[5] Panafidin M.A., Bukhtiyarov A.V., Prosvirin I.P., Zubavichus Y.V., Bukhtiyarov V.I. // Surfaces and Interfaces. 2023. V. 41. P. 103255.

СД-IV-40

Ацетатные комплексы Pt(II) и Pd(II) с гомологами пиридина — предшественники нанесенных катализаторов

Панина М.В.[1,2], Якушев И.А.[2]

1 –Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

2 – Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова, Москва, Россия

maaria381@gmail.com

Карбоксилатные комплексы металлов платиновой группы представляют собой перспективный класс соединений, служащий основой для разработки новых функциональных материалов [1]. Особый интерес вызывают углеродные нанотрубки (УНТ), модифицированные наночастицами платины или палладия, что обусловлено их высокими каталитическими и электрохимическими характеристиками [2]. В этой связи ключевой задачей является обеспечение высокой дисперсности металлических наночастиц и их равномерного распределения на поверхности носителя в процессе осаждения, поскольку именно эти факторы напрямую определяют конечные свойства получаемого материала.

Традиционно для синтеза таких систем в качестве прекурсоров применяются простые неорганические соли, такие как хлориды платины(II) или палладия(II). В рамках данного исследования была предложена альтернативная методика, заключающаяся в использовании молекулярных ацетатных комплексов. Их принципиальное преимущество перед хлоридными аналогами заключается в более высокой растворимости в органических растворителях, а также в способности восстанавливаться до металла при более мягких условиях.

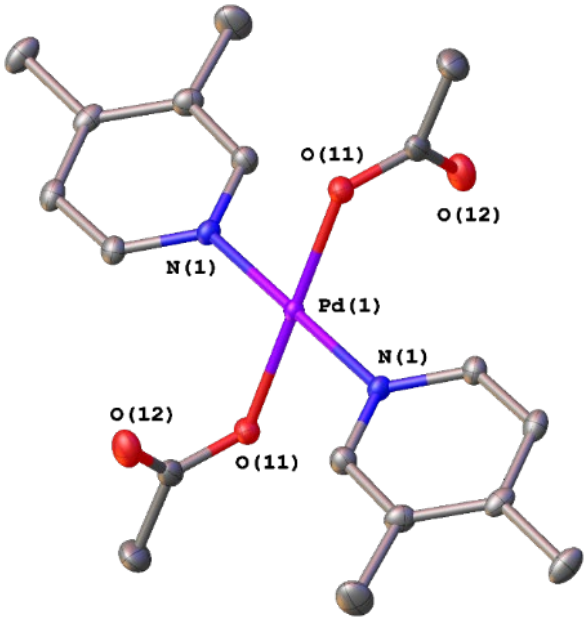


Рис. 1. Кристаллическая структура $[(3,4\text{-Lut})_2Pd(OOCMe)_2]$

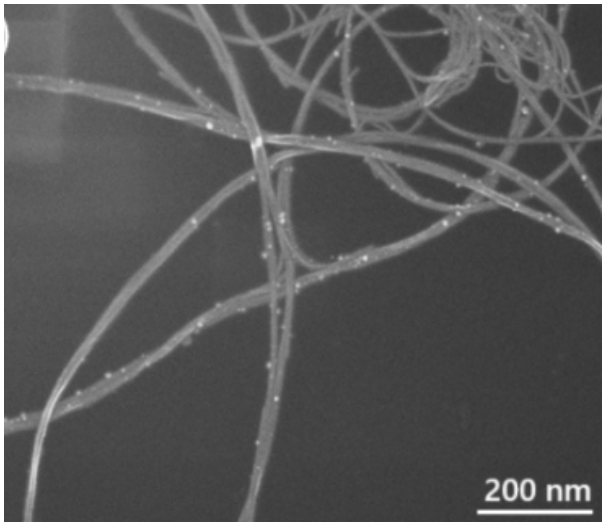


Рис. 2. СЭМ изображение ОУНТ/$(3,4\text{-Lut})_2Pd(OOCMe)_2$

В соответствии с ранее разработанными и модифицированными в данной работе методиками [3, 4] был синтезирован и расширен ряд молекулярных ацетатных комплексов платины(II) и палладия(II) с общей формулой $[L_2M(OOCMe)_2]$ (L = Py, 2-Pic, 4-Pic, 3,4-Lut, 3,5-Lut; M = Pt, Pd) (рис. 1). Для допирования углеродных нанотрубок (рис. 2) в мягких условиях была выбрана эффективная стратегия, включающая методы пропитки и восстановления.

Кристаллические структуры молекулярных комплексов были установлены методом рентгеновской дифракции монокристаллов с использованием синхротронного излучения, а спектроскопические методы подтвердили состав полученных соединений.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ИОНХ РАН.

Литература:

[1] Wang S. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2014. Vol. 6. No. 15. P. 12429.
[2] Gangeri M. et al. // Catalysis Today. 2009. Vol. 143. No. 1-2. P. 57.
[3] Popova A.S. et al. // Mend. Commun. 2022. Vol. 32. No. 5. P. 576.
[4] Panina M.V. et al. // Mend. Commun. 2024. Vol. 34. No. 6. P. 808.

СД IV-41

Разработка метода синтеза биметаллических катализаторов Fe-Pt/$Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ для процесса паровой конверсии CO с использованием методов рентгеновской дифракции для контроля состава и структуры материалов

Пахарукова В.П.[1], Рогожников В.Н.[1], Харченко Н.А.[1,2], Стонкус О.А.[1], Сараев А.А.[1], Горлова А.М.[1], Потемкин Д.И.[1]

1 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

verapakharukova@yandex.ru

Каталитический процесс паровой конверсии CO (ПК CO) используется в качестве технологии очистки от примесей CO получаемого для питания топливных элементов водорода. Ранее показана эффективность и перспективность использования нанесенных катализаторов Pt/$Ce_{1-x}Zr_xO_2$ для проведения ПК CO в рамках процесса получения водорода в портативных установках [1,2]. Замена части дорогостоящей платины на существенно более дешевое и доступное железо может позволить получить более рентабельные и доступные катализаторы с сохранением эффективности.

Данная работа посвящена разработке и апробированию технологии получения биметаллических катализаторов Fe-Pt/$Ce_{1-x}Zr_xO_2$, основанной на синтезе монометаллических катализаторов Fe/$Ce_{1-x}Zr_xO_2$ и последующем замещении поверхностных атомов наночастиц металлического железа на атомы платины с использованием технологии гальванического замещения. В качестве основных методов контроля состава и структурных особенностей как монометаллических Fe/$Ce_{1-x}Zr_xO_2$ так и биметаллических систем Fe-Pt/$Ce_{1-x}Zr_xO_2$ на разных этапах синтеза использованы методы рентгеноструктурного анализа. Проведены исследования систем методами *ex situ* порошковой дифракции. Для контроля этапа получения монометаллических Fe/$Ce_{1-x}Zr_xO_2$ катализаторов проведены исследования процесса восстановления систем в водородсодержащей атмосфере методами *in situ* порошковой дифракции. Для диагностики ультрадисперсных, не детектируемых методом рентгенофазового анализа компонентов катализаторов использован рентгенографический метод анализа распределения атомных пар (X-ray atomic pair distribution analysis – PDF analysis). Также для диагностики использованы методы рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения.

Благодарность: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-20075.

Список литературы:

[1] Gorlova A.M., Panafidin M.A., Shilov V.A., Pakharukova V.P., Snytnikov P.V., Potemkin D.I. // International Journal of Hydrogen Energy. 2023. V.48. N32. P.12015-12023.

[2] Горлова А.М., Пахарукова В.П., Стонкус О.А., Рогожников В.Н., Гладкий А.Ю., Снытников П.В. // Кинетика и катализ. 2023. Т.64. №4. С.447-456.

СД-IV-42

Особенности процесса роста металлических и нитридных покрытий на основе высокоэнтропийных сплавов, выявленные методами синхротронного излучения

Петрикова Е.А.[1], Иванов Ю.Ф.[1], Прокопенко Н.А.[1], Коваль Н.Н.[1], Шмаков А.Н.[2]
1 – Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия
2 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
petrikova@opee.hcei.tsc.ru

Покрытия и пленки, в том числе и керамические, сегодня являются одной из наиболее востребованных форм промышленного и медицинского применения различных материалов. Наиболее часто структуру пленок ВЭС изучают высокоразрешающими методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии. Однако данный метод исследования и многие ему подобные позволяет проводить изучение структуры уже сформировавшейся пленки. Использование для исследований синхротронного излучения, даёт возможность провести исследование структуры материала, применяя методы рентгеноструктурного анализа с высоким инструментальным разрешением [1], а также рассмотреть эволюцию структуры и фазового состава материала пленки в процессе ее формирования. Так в работах [2, 3] с помощью катодно-дуговой испарительной камеры оригинального изготовления, приспособленной для исследований с использованием синхротронного излучения, были выполнены in situ исследования эволюции напряжения/деформации и микроструктуры поликристаллических тонких пленок нитрида AlxTi1-xN (x = 0, 0,25, 0,5 и 0,67) при различном напряжении смещения подложки.

Целью настоящей работы являлось исследование процесса формирования металлических и нитридных покрытий на основе высокоэнтропийного сплава (ВЭС) состава TiNbZrTaHfCu, выполненное in situ методом рентгенофазового анализа с высоким инструментальным разрешением с использованием синхротронного излучения. Эксперименты проводились на установке ВЭИПС-1 [1], разработанной в ИСЭ СО РАН и установленной на третьем канале синхротрона ВЭПП-3 в ИЯФ СО РАН.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Грант № 24-69-00074).

Литература:

[1] Ivanov Yu.F., Akhmadeev Yu.H., Prokopenko N.A., Koval N.N., Shugurov V.V., Petrikova E.A., O.V. Krysina, Tolkachev O.S.// Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics 2023. 87: 250-258.
[2] Schroeder J.L., Thomson W., Howard B., Schell N., N¨aslund L., Rogstr¨om L., Johansson-J˜oesaar M.P., Ghafoor N., Od´en M., Nothnage E., Shepard A., Greer J., Birch J. //Rev. Sci. Instrum. 2015. 86: 95113.
[3] Nayak S., Hsu T.W., Boyd R., Gibmeier J., Schell N., Birch J., Rogstr¨om L., Od´en M.// Acta Materialia 2024. 272: 119899.

СД-IV-43

Алгоритм уточнения параметров кристаллической решетки с применением формулы Дебая по дифракционным данным

Петров И.Ю.[1,2], Яценко Д.А.[1,2]
1 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
i.petrov2@g.nsu.ru

Уравнение рассеяния Дебая (DSE — Debye Scattering Equation) представляет собой мощный инструмент, позволяющий описывать дифракцию рентгеновского излучения от наноразмерных объектов, характеризующихся сложной морфологией [1] и наличием структурных дефектов [2]. Однако основным ограничением данного метода являются существенные вычислительные затраты, необходимые для перебора всех межатомных расстояний в атомистической модели. Это затрудняет разработку современных программ для персональных компьютеров (ПК) по автоматическому уточнению 3D атомистических моделей и в большинстве исследований DSE используется скорее для качественных оценок. Основная сложность заключается в уточнении размеров частиц, параметров решетки и координат атомов. Уточнение подразумевает многократный пересчёт дифракции при итерационном изменении параметров модели.

Задача уточнения может быть упрощена путем работы с функциями распределения межатомных расстояний. Так, например, Cervellino и др. разработали подход [3] для уточнения размеров по экспериментальным дифракционным картинам на основе базы данных распределений межатомных расстояний. Однако в настоящее время в литературе отсутствуют алгоритмы, позволяющие проводить уточнение параметров элементарной ячейки и атомных позиций в рамках данного подхода. Настоящая работа посвящена разработке метода для решения первой из указанных задач – уточнения параметров элементарной ячейки.

Ключевой принцип предложенного алгоритма состоит в оперировании не абсолютными межатомными расстояниями, а их проекциями, выраженными в долях векторов элементарной ячейки (т.е. в ее базисе). Это позволяет при изменении параметров ячейки учесть изменения в базе расстояний, без перестроения новой базы. Следствием данного подхода является модификация стандартного алгоритма перебора межатомных расстояний: он должен быть дополнен хранением трех массивов, содержащих компоненты проекций разностных векторов для каждой пары атомов.

Для апробации предложенного алгоритма был реализован программный код на языке Python. Он предназначен для расчета дифракционных картин как стандартным методом с полной перестройкой базы, так и новым предлагаемым способом. Для этого были построены трёхмерные атомистические модели наночастиц псевдобемита (AlOOH) размером до 10 нм (~4000 атомов), параметры решётки (a, b, c) которых выбирались случайным образом в пределах 2% от референсных значений. Затем для них были рассчитаны соответствующие

дифракционные картины, которые подгонялись (примерно за 30 шагов) с целевой точностью до 0.01 %. Вычисления проводились на стандартном ПК на процессоре AMD Ryzen 5.

Необходимость сохранения дополнительных 3-х массивов с проекциями разностных векторов привела к увеличению вычислительных затрат на каждую дифракционную картину: со 80 до 120 секунд, а параметры решётки сходились в среднем за 180 секунд. При этом, полный пересчёт дифракционной картины стандартным методом, требующим перебора всех межатомных координат при каждой итерации, занял бы приблизительно 30 шагов × 80 сек. = 2400 секунд. Исходя из этого, вычислительная сложность стандартного подхода на порядок превышает аналогичный показатель для предложенного алгоритма, что демонстрирует его существенную эффективность.

Таким образом, предложенный алгоритм обладает значительным преимуществом в скорости при проведении многократных итеративных процедур уточнения параметров кристаллической решётки. Данный результат дополняет ряд работ направленных на разработку алгоритмов и программного обеспечения пригодных для обычных ПК для автоматического уточнения 3D моделей наночастиц с использованием DSE.

Благодарности: Работа выполнена при поддержки Программы «Приоритет-2030», проект «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий», НГУ.

Литература:

[1] Chiche D. et al. // The Journal of Physical Chemistry C. 2008. Т. 112. №. 23. С. 8524-8533.
[2] Pakharukova V. P. et al. // Journal of Solid State Chemistry. 2021. Т. 302. С. 122425.
[3] Cervellino A. et al // Applied Crystallography. 2003. Т. 36. №. 5. С. 1148-1158.

СД-IV-44

Особенности кристаллизации пленок ПВДФ, модифицированных методом ионного облучения

Плиева Д.С.[1], Анохин Д.В.[2,3]

1 – Факультет фундаментальной физико-химической инженерии, МГУ, Москва, Россия

2 – Химический факультет МГУ им. Ломоносова, Москва, Россия

3 – ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка, Россия

danaplieva099@gmail.com

ПВДФ является перспективным полимерным материалом благодаря уникальному комплексу пьезо-, пиро- и диэлектрических свойств. Модификация свойств ПВДФ методом ионного облучения позволяет целенаправленно изменять его надмолекулярную структуру за счет радиационно-индуцированного сшивания.

Пленки ПВДФ и П(ВДФ-со-ГФП) были получены методом нанесения с помощью ракельного ножа на приборе Mini Tape Casting Coater. Полученные пленки толщиной 40 мкм высыхали в атмосфере воздуха при 60^{o}C и подвергались отжигу при 165^{o}C в течение суток. Затем пленки облучали пучком ионов ксенона в вакууме на ускорителе У-400 в Лаборатории ядерных реакций (Объединенный институт ядерных исследований, Дубна). Термическая обработка образцов при 100 °C проводилась с целью рекомбинации стабильных радикалов и формирования поперечных сшивок.

Сшитые и референсные образцы были кристаллизованы при 160℃ в течение суток, 162,5℃ в течение 2 суток, при 162,5℃ в течение 5 суток и охарактеризованы с помощью поляризационной оптической микроскопии.

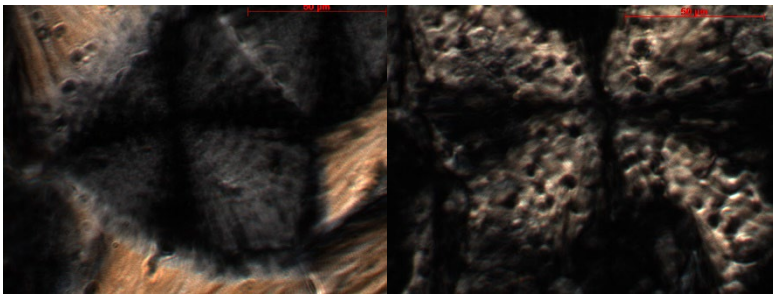


Рис1 – сшитый(справа) и референсный(слева) ПВДФ кристаллизованный 160℃ в течение суток

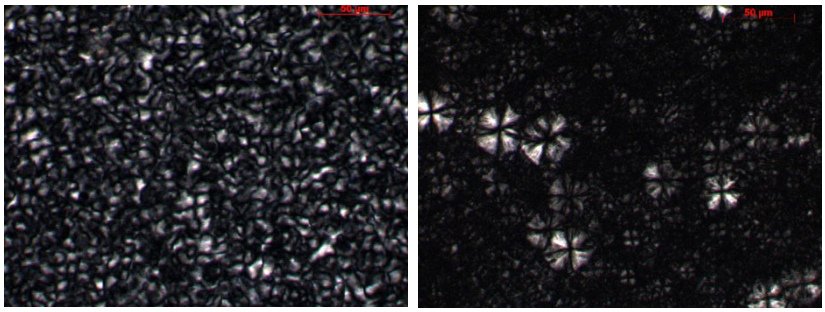


Рис2 – сшитый(справа) и референсный(слева) сополимер П(ВДФ-со-ГФП) кристаллизованный 162,5℃ в течение 2 суток

В дальнейшем модифицированные пленки ПВДФ будут изучены с использованием возможностей синхротронного излучения.

СД-IV-45

In-situ исследование высокотемпературной карбонизации коксов с применением синхротронного излучения

Пригородова А.Н.[1], Созинов С.А.[1], Шмаков А.Н.[2]
1 – Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН, Кемерово, Россия
2 – ЦКП СКИФ, Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
h991@ya.ru

Высокотемпературная карбонизация является ключевым процессом комплексной переработки угля, в результате которого получают такие ценные продукты углехимического производства, как каменноугольная смола, активированный уголь и кокс. Кокс, в частности, является критически важным сырьем в коксохимической промышленности, но несмотря на его важное значение в промышленности процессы эволюции структурного каркаса угля в процессе карбонизации остаются недостаточно ясными из-за отсутствия детальных in-situ исследований, которые отслеживают изменения в режиме реального времени. Понимание протекающих превращений имеет важное значение, поскольку они определяют термохимические трансформации угля в различные продукты и могут оказывать влияние на последующие процессы, такие как сжигание, газификация и сжижение. Более того для полного понимания механизмов карбонизации закономерности процессов, лежащих в основе структурных изменений, необходимо дополнять данными об одновременно происходящей эволюции поровой структуры и молекулярного скелета, что должно способствовать дальнейшему развитию и оптимизации технологических процессов карбонизации.

Анализ литературных данных показал, что практически отсутствуют исследования, в которых проводится одновременное наблюдение in-situ за изменением в структуре пор и углеродного скелета. Полностью отсутствуют in-situ наблюдения за структурной эволюцией при охлаждении кокса после высокотемпературной карбонизации. Что также не способствует развитию оптимальных технологических подходов карбонизации.

В представляемой работе рассматривается два образца полукокса, которые постепенно нагревались до 1500 °C и охлаждались в вакууме при in-situ исследовании протекающих изменений комплексом методов малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и рентгеновской дифракции с использованием синхротронного излучения. Применение такого подхода к исследованию позволяет неразрушающе описать структуру, способствуя детальному пониманию происходящей эволюции структуры пор и углеродного скелета.

Полученные результаты должны способствовать пониманию механизмов, определяющих изменения пор и углеродного скелета, что в свою очередь помогает повышению эффективности процессов переработки угля.

Благодарности: Исследование выполнено с использованием оборудования Центра коллективного пользования ФИЦ УУХ СО РАН в рамках тематики государственного задания № 124041100046-75.

СД-IV-46

Исследование структуры наночастиц Fe-Pt, внедрённых в углеродную матрицу, методом рентгеновской дифракции на синхротронном излучении

Пригородова А.Н.[1], Захаров Н.С.[1], Шмаков А.Н.[2], Адодин Н.С.[1]
1 – Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН, Кемерово, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Новосибирск, Россия
h991@yandex.ru

Наночастицы взаимной системы Fe-Pt не перестают вызывать повышенный интерес в научном сообществе благодаря огромному потенциалу их использования в различных областях науки и техники (сверхвысокоплотная магнитная запись, катализ и биомедицина). Известно, что их свойства, в особенности уникальные магнитные характеристики, в высокой степени зависят от атомно-структурных особенностей, таких как степень химического упорядочения, искажения кристаллической решётки и размерные эффекты. Однако из-за присущих наноматериалам эффектов ограниченного размера и локальной структурной неупорядоченности традиционные структурные методы анализа, основанные на рентгенофазовом и рентгеноструктурном анализе с использованием излучения от лабораторного источника, с трудом позволяют всесторонне и точно раскрыть полную структурную информацию. Использование же пористых углеродных матриц в качестве носителя наночастиц Fe-Pt дополнительно ухудшает столь сложную дифракционную картину. В связи с этим использование методов рентгеновской дифракции на синхротронном излучении для установления структурных особенностей наночастиц Fe-Pt является острой необходимостью.

Нанесение частиц Fe-Pt на поверхность углеродного носителя проводили методом совместного восстановления растворов прекурсоров гидразин-гидратом. Методом рентгеновской дифракции на синхротронном излучении исследован механизм образования упорядоченных фаз интерметаллидов $FePt_3$ ($L1_2$) и FePt ($L1_0$) в пористой углеродной матрице в процессе нагревания в инертной атмосфере в режиме *ex situ*. Выявлено, что при нагревании нано композита Fe-Pt/C до 600 °C происходят термокаталитические реакции, приводящие к восстановлению оксидных форм железа. Выдержка же при заданной температуре в течение 1 ч позволяет сформировать в пористой углеродной матрице наночастицы интерметаллида FePt размерами 7 нм со структурой $L1_0$ с параметрами решётки a = 3,85 Å, c = 3,74 Å, что соответствует 45 ат. % содержанию железа, а также интерметаллида $FePt_3$ со структурой $L1_2$ размером 6 нм с параметром решётки 3,865 Å, что соответствует 27 ат. % содержанию железа.

Полученные данные свидетельствуют о перспективности выбранного способа осаждения наночастиц Fe-Pt на пористый углеродный носитель с целью формирования на его поверхности и внутри пор упорядоченных фаз интерметаллидов $FePt_3$ и FePt со структурами $L1_2$ и $L1_0$, соответственно.

Благодарности: Исследование выполнено за счёт средств гранта Российского научного фонда (грант № 23-13-00356), https://rscf.ru/project/23-13-00356 с использованием оборудования Центра коллективного пользования ФИЦ УУХ СО РАН.

СД-IV-47

Фторированный графит как управляемая система для активации и термической деинтеркаляции диоксида азота

Семушкина Г.И., Федосеева Ю.В., Шубин Ю.В., Пинаков Д.В., Окотруб А.В., Булушева Л.Г.
ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия
semushkina.g@niic.nsc.ru

Графит — слоистая аллотропная форма углерода со слабыми Ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями между слоями с расстоянием ~3.35 Å, что обеспечивает возможность интеркаляции различных соединений, но размер внедряемых молекул ограничен этим расстоянием. Низкотемпературное фторирование графита увеличивает межслоевое расстояние до ~6.2 Å с возможностью регулировки за счет концентрации фтора. Это расширенное межслоевое пространство позволяет внедрять крупные молекулы, образуя включения с содержанием гостевых частиц до 16 ат.%. Интеркалирование молекул в CF с варьируемой степенью фторирования было подробно изучено и широко используется на практике – как основа топливных элементов, аккумуляторов, сенсорных устройств, в частности, для обнаружения и хранения антропогенного загрязнителя - NO_2. Однако в настоящее время до конца не изучен механизм удаления молекул гостя из межслоевого пространства CF с различной степенью фторирования, что имеет решающее значение для оптимизации процесса детектирования и достижения желаемых свойств материала.

Таким образом, целью работы является проведение сравнительного анализа структурной и химической эволюции CF с различной степенью фторирования с внедренными молекулами NO_2 до и после термической деинтеркаляции при 200^oC с использованием методов рентгеновской дифракции, ИК-спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) и околопороговой тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (NEXAFS) в сочетании с квантово-химическим моделированием рентгеновских спектров в рамках теории функционала плотности (DFT).

Степень фторирования CF играет ключевую роль как на состав продуктов редокс-превращений NO_2 в межслоевом пространстве, так и на эффективность удаления этих соединений при мягком отжиге на воздухе. В среднефторированном графите ($CF_{0.36}$, $CF_{0.27}$) образуются разнообразные азотсодержащие соединения (HNO_3, NO, NO_2, N_2), тогда как в слабофторированном ($CF_{0.03}$, $CF_{0.01}$) преобладают HNO_3 и NO. «Молекулы-гости» могут быть легко удалены из межслойного пространства среднефторированного графита при нагревании и матрица CF претерпевает лишь незначительные изменения. В слабофторированном графите замена гостевого компонента приводит к почти полному исчезновению слабосвязанного фтора и адгезии графитовых слоев из-за сильных Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий. Следовательно, «молекулы-гости» не удаляются из слабофторированных образцов, а вместо этого вступают в реакцию с матрицей, а азот и кислород встраиваются в структуру графита.

Благодарности: Автор выражает благодарность Сибирскому суперкомпьютерному центру СО РАН за предоставленные вычислительные ресурсы для проведения численных экспериментов. (http://www.sscc.icmmg.nsc.ru).

СД-IV-48

Щёточные полимеры на основе акрилатов и изучение процессов их самосборки

Синёва Л.О.[1], Вашуркин Д.В.[2,3], Иванов Д.А.[2,3]
1 – Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, факультет физико-химической инженерии, Москва, Россия
2 – Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
3 – Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка, Россия
ladasineva@mail.ru

Гибридные материалы на основе щёточных полимеров представляют собой перспективное направление в материаловедении. В данной работе был представлен синтез поли(трет-бутилакрилата), поли(н-бутилакрилата) с различными степенями полимеризации (21, 50, 100 и 150) и полистирола со степенью полимеризации 50 и 100 методом ATRP. На основе синтезированных полимеров были получены макромономеры путем замещения концевого атома брома на метакрильную группу с использованием синтезированного метакрилата калия (КОМА).

Затем был синтезирован щёточный полимер путём полимеризации макромономера PnBA50-MA. В процессе синтеза использовались различные каталитические и инициирующие системы для выбора оптимальных параметров. Параллельно данная методика была применена для получения полимеров на основе коммерческого макромономера, что позволило успешно синтезировать щётки на основе поли(этиленгликоль)метакрилата со степенью полимеризации 100.

В результате синтеза были получены полимеры с контролируемой архитектурой и низкой дисперсностью. Анализ методом ГПХ подтвердил успешное проведение реакций, а ЯМР-спектроскопия показала наличие целевых функциональных групп. Следует отметить, что синтезы на основе PnBA50-MA оказались плоховоспроизводимыми, в то время как метод demonstrated эффективность для работы с различными типами макромономеров.

В дальнейшем полученные образцы были проанилизораны с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния, результаты которого показали наличие характерного щеточного пика, что позволило подтвердить структуру (рис.1). Данные полимеры перспективны для создания материалов с уникальными механическими свойствами путём варьирования структурных параметров, что расширяет возможности их применения в биомедицине и материаловедении.

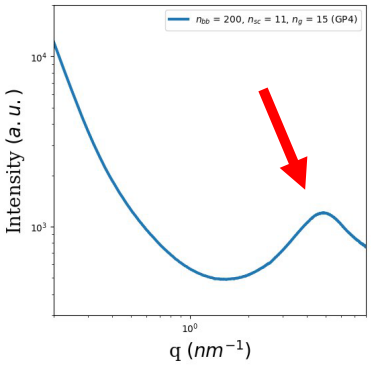


Рис. 1 — Кривая рассеяния рентгеновских лучей (малые углы)

Благодарности: Работа выполнена в рамках госзадания № FFSG-2024-0017.

Литература:

[1] Mitchell Maw, Benjamin J. Morgan, Erfan Dashtimoghadam, Yuan Tian, Egor A. Bersenev, Alina V. Maryasevskaya, Dimitri A. Ivanov, Krzysztof Matyjaszewski, Andrey V. Dobrynin, and Sergei S. Sheiko. Brush Architecture and Network Elasticity: Path to the Design of Mechanically Diverse Elastomers// Macromolecules 2022, 55, 2940−2951.

СД-IV-49

Комплексное исследование Pd-M (M=Au, Cu)/Al_2O_3 катализаторов с ультрамалыми содержаниями палладия методами XAFS и DRIFT спектроскопии

Смирнова Н.С.[1], Храмов Е.В.[2], Машковский И.С.[1], Баева Г.Н.[1], Мельников Д.П.[1,3], Марков П.В.[1], Стахеев А.Ю.[1]

1 – Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия
2 – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
3 – РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия
ns-smirnova@ioc.ac.ru

Этилен является ценным исходным сырьем для получения полиэтилена, и его общемировое производство увеличивается с каждым годом. В настоящее время этилен получают пиролизом углеводородов, в ходе которого образуются большое количество примесей и побочных продуктов, в том числе ацетилен в концентрациях до 1-2 об.%, являющийся ядом для катализаторов полимеризации [1]. Наиболее распространенным способом очистки этиленовых потоков от примесей ацетилена является его селективное гидрирование на палладийсодержащих катализаторах, модифицированных вторым элементом, в роли которого чаще всего используют металлы IB группы (Ag, Au, Cu) [1, 2].

К особенностям промышленных катализаторов гидрирования примесей ацетилена относится как ультрамалое (сотые доли масс. %) содержание активных компонентов, так и крайне неравномерное («корочковое») распределение компонентов по зерну катализатора, вследствие чего возникает проблема характеризации подобных систем физическими методами. В этом случае EXAFS/XANES-спектроскопия является незаменимым методом исследования объемной структуры катализатора, позволяя определить состав и охарактеризовать структуру образующихся фаз. Кроме того, методы XAFS помогают ответить на вопросы о формировании биметаллической структуры с атомами палладия, изолированными атомами промотора, ответственной за высокую селективность по этилену. Для более подробной характеристики полученных образцов в настоящем исследовании использовалась DRIFT-спектроскопия адсорбированного CO в качестве метода анализа поверхности катализатора.

В данной работе представлены возможности применения XAFS- и DRIFT- спектроскопии адсорбированного CO для получения ценной информации о фазовом и электронном состоянии палладия и промотора (M: Au, Cu) в биметаллических катализаторах селективного гидрирования ацетилена с ультрамалыми (порядка 0.1-0.15 масс.%) содержаниями палладия.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-13-00301, https://rscf.ru/project/23-13-00301).

Литература:

[1] Xie K., Xu K., Liu M., Song X., Sh. Xu, Si H. // Materials Today Catalysis. 2023. V.3. P. 100029
[2] Николаев С.А., Занавескин Л.Н., Смирнов В.В., Аверьянов В.А., Занавескин К.Л. // Успехи химии. 2009. Т. 78. С. 248–265

СД-IV-50

Картографирование в синхротронном методе резонансной рентгеновской рефлектометрии для неразрушающего определения профилей химического состава, степени окисления и намагниченности по глубине

Дворцова П.А., Лобанова Е.Ю., Коровин А.М., Сутурин С.М.
ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
suturin@mail.ioffe.ru

В настоящей работе описывается интеллектуальный вычислительный подход к рентгеновской резонансной рефлектометрии – синхротронному методу для неразрушающей характеризации эпитаксиальных наноразмерных многослойных структур с низким оптическим контрастом между материалами подслоев. Резонансное отражение от исследуемых многослойных структур измеряется в данном методе, как функция угла скольжения и энергии фотонов на краях поглощения входящих с состав структуры химических элементов, а затем моделируется с помощью разработанного авторами программного обеспечения. Для выполнения расчетов отражения требуются знания плотностей длин рассеяния (SLD) материалов, значения которых в нерезонансной области известны из таблиц Хенке. Сложная спектральная форма SLD на краях поглощения, где как действительная, так и мнимая части оптической плотности демонстрируют резкую зависимость от энергии, существенно затрудняет подгонку экспериментальных данных, но в то же время позволяет различать отдельные химические элементы по данным резонансной рефлектометрии. Традиционный подход к моделированию заключается в том, чтобы вычислить часть Im(SLD) из измерений рентгеновской спектроскопии поглощения от эталонного материала, а затем получить часть Re(SLD) через соотношения Крамерса-Кронига (КК). Хотя этот подход выглядит довольно простым, необходимо учитывать, что спектры поглощения эталонных материалов могут отличаться от спектров материалов внутри изучаемой гетероструктуры. В нашем подходе мы не используем эталонные данные. Спектральные формы SLD строятся с помощью процедуры фитирования с использованием полуслепого подхода, предполагающего, что мнимая часть SLD на краю поглощения имеет форму пика Лоренца, наложенного на ступенчатую функцию. Параметры, вышеуказанных функций могут быть подобраны фитирующей процедурой, после чего действительная часть SLD может быть рассчитана с использованием преобразования КК. Преимущество описанного подхода заключается в том, что энергетическое положение пика определяется автоматически с учетом смещения монохроматора и энергетических сдвигов, связанных со степенью окисления и кристаллографическим окружением атома.

Возможности метода продемонстрированы на ряде эпитаксиальных гетероструктур с низким оптическим контрастом вдали от краев поглощения. Так, в бислоях Eu_2O_3 / $Gd_3Ga_5O_{12}$ с различным порядком подслоев измерения проводились на L краях поглощения Eu и Gd. Показано, что в этом случае не только химический состав, но и последовательность слоев могут быть эффективно восстановлены автоматически из двумерных резонансных карт отражения (Рис. 1). Метод был также успешно применен нами для нахождения профилей

степени окисления Eu в многослойных гетероструктурах на основе полиморфов оксидов европия Eu_2O_3 / Eu_3O_4. Было показано, что картографирование в резонансной рентгеновской рефлектометрии может быть применено не только к слоям толщиной десятки нанометров, но и к сверхтонким слоям двумерного полупроводника WS_2, выращенных эпитаксиально на подложках сапфира.

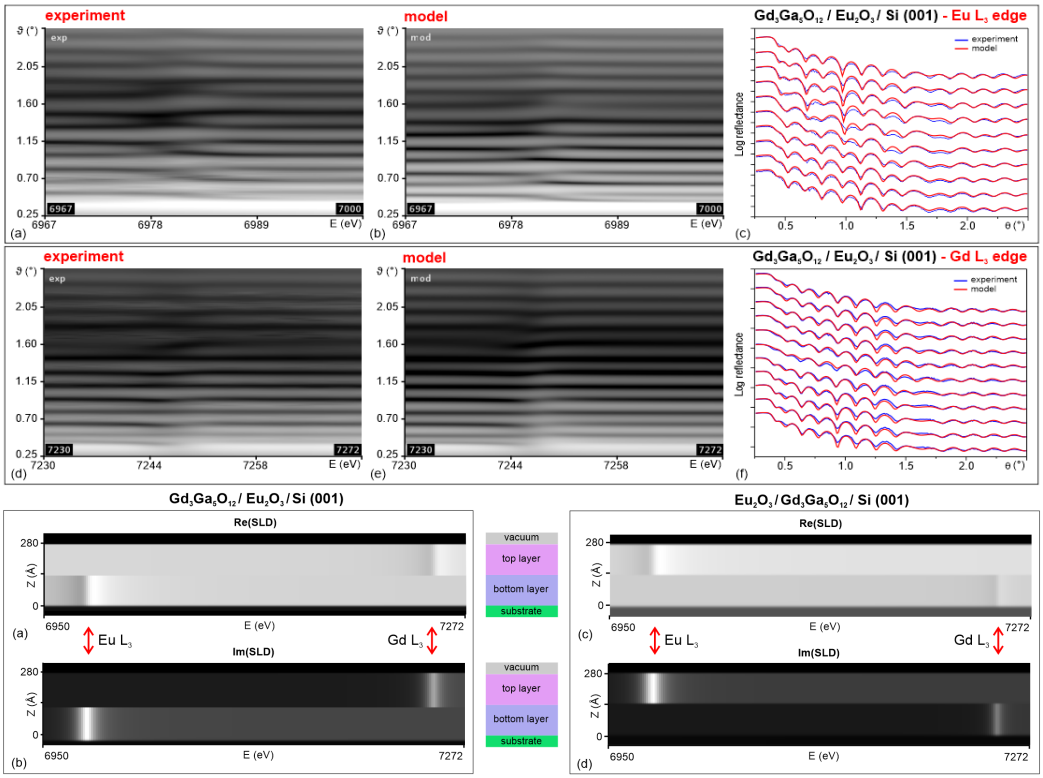


Рис. 1. Сверху: резонансное отражение в бислое GGG / Eu_2O_3. Экспериментальные и смоделированные карты в диапазоне энергий, соответствующих L краям поглощения Eu (a, b) и Gd (d, e). Вертикальные сечения (кривые отражения) экспериментальных и смоделированных карт, построенные для нескольких дискретных значений энергии вблизи L краев Eu и Gd(c, f). Снизу: реконструированные зависимости спектральных форм Re(SLD) (a, c) и Im(SLD) (b, d) от глубины, полученные с помощью автоматического алгоритма слепого фитирования, примененного к экспериментальным картам резонансного отражения.

Таким образом, проведенные исследования [1, 2, 3] показали, что независимо от диапазона энергий, синхротронный метод картографирования резонансной рефлектометрии в сочетании с интеллектуальным слепым моделированием, позволяющим реконструировать спектральные формы оптических плотностей, является весьма эффективным и перспективным инструментом для выполнения неразрушающего профилирования по глубине в исследованиях, связанных с многослойными гетероструктурами.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1349).

Литература:

[1] Dvortsova P, Suturin S. // J Appl Crystallogr, 2024, 57, 151
[2] Dvortsova P A, Korovin A M, Ukleev V, et al. // J Appl Phys, 2024, 135, 055302
[3] Dvortsova P A, Suturin S M // Thin Solid Films, 2024, 806, 140517

СД-IV-51

Структура медных центров цеолита-морденита по данным рентгеновской спектроскопии XANES

Сухарина Г.Б., Ермакова А.М., Гладченко-Джевелекис Я.Н., Корсун А.Е., Чекалина Е.В., Лысенко Е.Е., Шеметова Э.И., Авакян Л.А., Бугаев Л.А.
Южный федеральный университет, физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия
gbsukharina@sfedu.ru

Прямое окисление метана до метанола представляет собой актуальную задачу для современного катализа. Реализация такого процесса осложнена высокой реакционной способностью метанола по сравнению с метаном, что способствует полному окислению до CO_2 и H_2O. Для повышения селективности реакции активно разрабатываются катализаторы на основе цеолитов, модифицированных переходными металлами, в частности медью [1-4]. Для создания катализаторов с заданными свойствами ключевой задачей является установление взаимосвязи между локальной атомной структурой атомов меди на всех этапах каталитического цикла с условиями и методами синтеза медьсодержащих цеолитов, поскольку именно формируемые активные центры меди во многом определяют каталитические свойства.

Исследование посвящено определению структуры медных центров цеолита типа Cu-морденит, синтезированного методом твердофазного ионного обмена. Было выполнено моделирование наиболее вероятного ближнего окружения атомов меди на различных этапах каталитического цикла. Расчеты спектров рентгеновского поглощения XANES за *K*-краем меди были реализованы в программном комплексе FDMNES [5] методом конечных разностей. Геометрическая оптимизация была выполнена с помощью теории функционала плотности (DFT) в программном пакете Quantum Espresso [6].

Наиболее вероятные структурные модели медных центров, формирующихся в каркасе цеолита Cu-MOR, были установлены с помощью комбинации рентгеновской спектроскопии поглощения (XANES) и компьютерного моделирования.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-22-00438.

Литература:

[1] Alayon E. M. C., Nachtegaal M., Bodi A., Ranocchiari M., van Bokhoven J. A. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2015. 17. P7681T.
[2] Srabionyan V. V., Sukharina G. B., Kurzina T. I., Durymanov V. A., Ermakova A. M., Avakyan, L. A., Alayon E. M. C., Nachtegaal M., van Bokhoven J. A., Bugaev, L. A // The Journal of Physical Chemistry C. 2021. 125. 46. P. 25867-25878.
[3] Borfecchia E., Beato P., Svelle S., Olsbye U., Lamberti C., Bordiga S. // Chemical Society Reviews. 2018. 47. 22. P. 8097-8133.
[4] Vanelderen P., Vancauwenbergh J., Sels B.F., Schoonheydt R.A. // Coordination Chemistry Reviews. 2013. 257. 2. P. 483-494.
[5] Joly Y. // Physical Review B. 2001. 63. 12. P. 125120.
[6] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo // J. Phys. Condens Matter. 2009. 21. 39. P. 395502.

СД-IV-52

Исследование материалов для калий-ионных аккумуляторов на основе дефектных пирохлоров методами синхротронной и нейтронной дифракций

Ташланов М.Ю., Федотов С.С.
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
M.Tashlanov@skoltech.ru

Калий-ионные аккумуляторы (КИА) являются одной из наиболее перспективных «пост-литий-ионных» технологий благодаря стоимости и доступности прекурсоров, а также электрохимическим характеристикам, подходящим для крупногабаритных применений [1]. Для выхода данной технологии из зачаточного состояния требуется, однако, дальнейший поиск и разработка новых электродных материалов и электролитов – основных частей КИА.

Дефектные пирохлоры состава $KM_xW_{2-x}O_6$ (M = Ta, Nb, Ti, Cr, Al; x = 0.33, 0.5, 1) были впервые исследованы как анодные материалы для КИА [2]. В частности, было показано, что данные системы обладают средним рабочим потенциалом (СРП) 1.08 – 1.39 В отн. K^+/K в зависимости от заместителя M в позиции W. Сдвиг СРП при переходе от одного заместителя M к другому был линейно коррелирован со структурными параметрами пирохлоров, полученными в результате уточнения данных синхротронной порошковой дифракции, а также фундаментальными параметрами заместителей (ионным радиусом и электроотрицательностью). Дополнительно к данным рентгеновской порошковой дифракции, с помощью которой был определён набор доступных позиций K в каркасе пирохлора, для определения позиции H в гидратированных системах $KM_xW_{2-x}O_6{\times}yH_2O$ – предшественников активных анодных материалов (безводных $KM_xW_{2-x}O_6$) – были уточнены данные нейтронной порошковой дифракции. Механизм (де)интеркаляции K^+ в структуру дефектных пирохлоров и механизм компенсации заряда были изучены с помощью *operando* порошковой рентгеновской дифракции и *operando* спектроскопии рентгеновского поглощения, соответственно. Было показано, что внедрение и извлечение K^+ может протекать как по твёрдорастворному, так и смешанному (твёрдорастворная и двухфазная области) механизмам, а единственным источником окислительно-восстановительной активности исследуемых дефектных пирохлоров является пара W^{6+}/W^{5+}. Полученные экспериментальные результаты (средний рабочий потенциал пирохлоров и их электрохимическая стабильность, ОВ активность W^{6+}/W^{5+} и др.) также хорошо согласуются с проведёнными теоретическими расчётами в рамках теории функционала плотности. Дополнительно, *in situ* высокотемпературная синхротронная порошковая дифракция была использована для определения температурной стабильности данных материалов в диапазоне 30 – 800 °C.

Дефектные пирохлоры $KTi_{0.5}W_{1.5}O_6$ и $KAl_{0.33}W_{1.67}O_6$ были также исследованы в качестве потенциальных твердотельных электролитов для КИА. С помощью метода искрового плазменного спекания были получены таблетки материалов с относительной плотностью >95% для дальнейшей электрохимической характеризации. Впервые измеренная ионная проводимость при комнатной температуре составила 0.7 мСм $см^{-1}$ ($KTi_{0.5}W_{1.5}O_6$) и 1.1 мСм $см^{-1}$

($KAl_{0.33}W_{1.67}O_6$), что, в последнем случае, является рекордным значением среди известных в литературе калий-ионных проводников [3].

В докладе будет подробно рассмотрен синтез, структурные особенности и электрохимические свойства $KM_xW_{2-x}O_6$ дефектных пирохлоров.

Литература:

[1] Min X., Xiao J., Fang M., Wang W. (Alex), Zhao Y., Liu Y., Abdelkader Amr. M., Xi K., Kumar R.V., Huang Z. // Energy & Environmental Science. 2021. Vol. 14. No. 4. P. 2186-2243.
[2] Tashlanov M.Yu., Aksyonov D.A., Marshenya S.N., Mikheev I.V., Antipov E.V., Fedotov S.S. // Journal of Alloys and Compounds. 2025. Vol. 1028. P. 180612.
[3]. Masese T., Kanyolo G.M. // ChemElectroChem. 2025. Vol. 12. No. 5. P. e202400598.

СД-IV-53

Термическая и ионная модификация биогибридного материала на основе молекул бактериоферритина Dps

Турищев С.Ю.[1], Беликов Е.А.[1], Паринова Е.В.[1], Коюда Д.А.[1], Чувенкова О.А.[1], Какулия Ю.С.[1], Чумаков Р.Г.[2], Лебедев А.М.[2], Преображенская Е.В.[1], Антипов С.С.[1]

1 – Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

2 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

tsu@phys.vsu.ru

Применение гибридных нанообъектов, сочетающих природные биоструктуры и неорганические наноматериалы, актуально в современной науке, технике и технологиях. Молекулы белка бактериоферритина Dps (DNA-binded protein from starved cells), получаемые из клеток кишечной палочки, являются уникальным объектом. Эти молекулы с размером внешней стенки ~ 10 нм представляют собой органическую био-оболочку полую внутри. Такие молекулы могут формировать во внутренней полости наночастицу – железосодержащее ядро размерами ~ 3-6 нм. Получение информации о составе и особенностях биогибридного материала на основе молекул бактериоферритина Dps, возможности изменения состава в результате внешних воздействий является актуальной задачей.

Рекомбинантный белок бактериоферритина Dps получался с использованием клеток кишечной палочки Escherichia coli (E.coli) BL21*(DE3) в качестве продуцентов. Клетки E.coli были трансформированы плазмидой pGEM_dps. Установлены размеры и особенности морфологии биологических контейнеров – молекул белка бактериоферритина Dps и неорганических наночастиц, содержащих атомы железа в этих молекулах. Показана специфика выделения молекулярной культуры белка бактериоферритина Dps клетками E.coli в состоянии суперпродукции белка. С целью выяснения возможностей вариации состава изученные биогибридные объекты подвергались термическому отжигу *ex-situ* на воздухе и в потоке водорода, *in-situ* в условиях сверхвысокого вакуума (10^{-9}Торр) при температурах до 400 С длительностью до 30 минут. С этой же целью была выполнена обработка биогибридного материала ионным пучком (Ar+, 1 кВ, 1 мкА, 30 минут).

Впервые с использованием методов XPS и XANES, в сочетании с методами электронной микроскопии, проанализирован состав и физико-химическое состояние в целом биогибридных материалов на основе молекул белка Dps, в том числе после температурной или ионной модификации. Показано наличие в наночастицах биогибридного материала атомов железа в различном зарядовом состоянии Fe3+ и Fe2+ и различной координации, а также возможность изменения состава наночастиц вплоть до восстановления железа при температурной или ионной обработке.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект No FZGU-2023-0006), а также соглашения N 075-15-2025-455 в части методических вопросов синхротронных исследований.

СД-IV-54

Влияние спин-орбитального взаимодействия на магнитные свойства и рентгеновские спектры галогенидных комплексов рения

Федоренко А.Д.[1], Асанов И.П.[1], Бердюгин С.Н.[1], Гребенкина М.А.[1], Николенко А.Д.[2,3]
1 – Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Кольцово, Россия
3 – Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия
fedorenko@niic.nsc.ru

В настоящее время особенный интерес вызывают исследования в области молекулярного магнетизма в связи с появлением мономолекулярных магнетиков. Данный эффект находит применения в фотонике, спинтронике, для термических сенсоров, оптических переключателей, в электронике и медицине в качестве микроэлектромеханических систем. Электронная структура и уникальные магнитные свойства таких материалов связаны со структурой ближайшего окружения парамагнитного металлоцентра и дальним магнитным порядков в соединениях. Использование 5d-переходных металлов позволяет получить комплексы с значительной магнитной анизотропией из-за релятивистских эффектов и сильного спин-орбитального взаимодействия. Следует отметить, что одними из перспективных соединений являются галогенидные октаэдрические комплексы Re(IV), обладающие большим значением спина S=3/2 и высоким значением параметра магнитной анизотропии, связанной со спин-орбитальным взаимодействием. Исследование механизмов, управляющих свойствами таких материалов являются актуальной научной задачей.

В данной работе были исследованы магнитные свойства и электронная структура с использованием как рентгеновских методов, так и квантовой химии, октаэдрических галогенидных комплексов Re(IV) $[NH_4]_2[ReCl_6]$, в которых происходит замещение аммоний-катиона на катион $[M(NH_3)_4]^{2+}$, M = Pd, Pt. Набор рентгеновских спектроскопических методов (рентгеновская спектроскопия поглощения, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия) дает возможность полностью охарактеризовать зарядовые, спиновые, орбитальные состояния атомов в системе. Рентгеновская спектроскопия поглощения (ближняя тонкая структура рентгеновского поглощения или XANES) и рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия широко используются для изучения электронной структуры материалов. Определение зарядового состояния атомов осуществляется по сдвигу спектральных линий. XANES спектры $L_{2,3}$ краев поглощения рения соответствуют переходам электронов с 2p состояний на свободные локализованные 5d состояния, что дает возможность изучать заселенность 5d состояний и оценивать степени окисления атомов рения. Re $L_{2,3}$ края показывают высокую чувствительность формы линии к параметрам ближайшего окружения. Измерение отношения интенсивностей белой линии L_3/L_2 краев поглощения рения дает возможность определить значение величины параметра спин-орбитального взаимодействия LS и число электронных дырок в системе. Использование Re L_1 краев поглощения позволяет исследовать 3 и более координационных сфер атомов Re, поскольку сканирует делокализованные 6p состояния

рения, и, следовательно, более чувствителен к геометрической структуре и магнитному упорядочению. Более того, XANES спектры K краев поглощения хлора октаэдрических комплексов переходных металлов оказались эффективными для изучения взаимодействия лигандов с центральным атомом металла. Предкраевая структура XANES спектров Cl K краев поглощения октаэдрических соединений рения связана с проявлением 5d-состояний рения из-за их гибридизации с 3p-состояниями хлора. В отличие от рентгеновских спектров поглощения, рентгеновские эмиссионные спектры (РЭС) характеризуют парциальные вклады и энергетическое положение валентной зоны. РЭС Cl K_β спектры соответствуют переходам электронов с занятых 3p состояний на 1s состояние. Таким образом, Cl K_β спектры дают информацию о парциальном распределении Cl 3p состояний в валентной зоне.

Для интерпретации полученных результатов были проведены расчеты для октаэдрических комплексов $[ReCl_6]^{2-}$ с использованием многоконфигурационного метода SA-CASSCF/NEVPT2 с учетом спин-орбитального взаимодействия. Совместное использование экспериментальных рентгеновских методов и теоретических расчетов позволило исследовать корреляции магнитные свойств – намагниченности, параметра магнитной анизотропии, с зарядовым, спиновым, орбитальным взаимодействиями. Теоретический анализ XANES спектров соединений Re с различными внешнесферными катионами показал, что электронная структура и магнитные свойства зависят от различных факторов, включая спин-орбитальное взаимодействие, величину кристаллического поля, энергию спаривания электронов и некубические искажения окружения атома рения. Анализ РЭС Cl K_β и XANES Cl K спектров при замещении катиона показал, что изменения формы спектров в первую очередь связаны с увеличением гибридизации 3p состояний хлора и 5d состояний металла.

Проведенные исследования показывают, что в октаэдрических комплексах $[ReCl_6]^{2-}$ наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к значительным искажениям Яна-Теллера. Замещение катионов в ряду $(NH_4)_2$ - $Pd(NH_3)_4$ - $Pt(NH_3)_4$ значительно влияет на магнитные свойства в октаэдрических комплексах рения, что может быть связано с влиянием катионного эффекта на электронную структуру и магнитные свойства вследствие перераспределения электронной плотности.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 25-22-00228.

СД-IV-55

Влияние химического состава поверхности поликристаллической алмазной пленки с графитовыми электродами на фотоотклик на рентгеновское излучение

Федосеева Ю.В., Городецкий Д.В., Федоренко А.Д., Булушева Л.Г., Седельникова О.В., Окотруб А.В.

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

fedoseeva@niic.nsc.ru

С целью развития методов диагностики, промышленности и медицины необходимо разработать чувствительные микродатчики мягкого рентгеновского излучения низкой интенсивности. Для этих целей перспективным материалом являются поликристаллические алмазные пленки, которые обладают чрезвычайно высоким сопротивлением, радиационной и химической устойчивостью и механической прочностью. Микродатчики на основе алмаза с нанесенными электродами на их поверхности способны преобразовать фото сигнал в электрический ток. В работе качестве исходного материала использовалась поликристаллическая алмазная пленка, которая была выращена на кремниевой подложке методом плазмохимического синтеза при активации микроволновым разрядом смеси водорода и пентана, а затем снята с подложки. Электропроводящие встречно-параллельные электроды были получены на ростовой поверхности алмазной пленки с помощью обработки ультрафиолетовым лазером на воздухе. В месте облучения лазером происходило травление алмазной пленки с образованием углублений трапецевидного сечения покрытых графитоподобным углеродом. Дополнительная модификация поверхности датчиков проводилась в результате нагрева в потоке разбавленного аргоном водорода при температуре 400 °C в течение 10 мин. Методами спектроскопии комбинационного рассеяния света и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии было проведено исследование структуры и состава поверхности датчика до и после его термической обработки в водороде. Воздействие лазерным излучением трансформирует поверхность алмаза с образованием дефектного окисленного графитоподобного слоя. Отжиг датчика в инертной атмосфере провел к упорядочению графитовой структуры электродов и удаления кислородсодержащих групп с поверхности датчика. Для испытаний было изготовлено устройство, в котором между графитовыми электродами подавалось напряжение от 50 до 300 В и регистрировался ток, протекающий между электродами по поверхности алмазной пленки, в темноте и при облучении рентгеновским излучением. Проведено сравнение фотоэлектрического отклика по отношению к излучению, генерируемому рентгеновской трубкой с медным анодом в режиме напряжений до 8 кВ, в лабораторном рентгеновском спектрометре «Стеарат». После обработки датчика в инертной атмосфере относительный фототклик увеличился до 144% при 300 В и до 580% при 50 В.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 22-72-10097-П.

СД-IV-56

Исследование деградации оксидного слоя в мемристивной системе TiOx

Гусейнов Т.З., Хаметова Э.Ф., Бакиева О.Р.
УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия
ftiran@mail.ru

Мемристоры – это особый тип электронных компонентов, представляющих собой резисторы с памятью. Термин происходит от слов “memory” (память) и “resistor” (сопротивление). Перспективность их использования обусловлена энергонезависимостью, низким энергопотреблением, высокой скоростью работы. Ключевыми сферами применения мемристивных устройств являются нейроморфные вычисления, машинное обучение, системы хранения и обработки данных. Существует проблема деградации и доокисления тонких металлических слоев в мемристорах, что влияет на качество работы и срок службы устройства.

В настоящей работе проведено исследование изменений, происходящих в мемристивном слое TiOx, нанесенном на контактную подложку из золота. Пленки оксида титана были синтезированы методом магнетронного распыления на установке «ЭПОС». Определены изменения элементного состава, происходящие с течением времени при нормальных условиях. Анализ проводился методом Оже-электронной спектроскопии на электронном микроанализаторе Jamp 10S (Jeol). Глубина анализа метода составляет 1-3 нм, что позволяет получать информацию в прецизионно тонком поверхностном слое. Для исследования распределения химических элементов по глубине мемристивного слоя использовалось распыление поверхности ионами аргона энергией 3 кэВ. Глубина мемристивного слоя была определена методом атомно-силовой микроскопии. Построены профили распределения химических элементов в нестехиометрическом слое TiOx, определена динамика изменений в оксидном слое в интервалах 0, 100, 200 дней.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках Соглашения № 075-15-2025-455 от 26.05.2025 г.

СД-IV-57

Структура и свойства нанотубулярных гидросиликатов состава $(Co_xNi_{1-x})_3Si_2O_5(OH)_4$

Храпова Е.К., Иванова А.А., Красилин А.А.
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
e.k.khrapova@mail.ioffe.ru

Нанотубулярные гидросиликаты со структурой хризотила являются перспективными материалами для применения в таких областях как катализ [1], адсорбция [2], энергетика [3] и некоторых других за счет своей уникальной структуры и возможности варьирования состава.

В данной работе были получены нанотубулярные гидросиликаты состава $(Co_xNi_{1-x})_3Si_2O_5(OH)_4$ методом обратного соосаждения с последующей гидротермальной обработкой с использованием в качестве гидротермальной среды Na_2SO_3 для предотвращения окисления кобальта. Характеризация полученных образцов осуществлялась методом просвечивающей электронной микроскопии, порошковой рентгеновской дифракции, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии диффузионного отражения.

Структурные и морфологические изменения, а также электронные свойства коррелировали с составом исследуемых образцов. По данным порошковой рентгеновской дифрактометрии распределение кристаллитов по размерам имело бимодальный характер, но становилось более узким и смещалось в область меньших значений при увеличении содержания кобальта в системе. Также наблюдалось уменьшение размеров наносвитков, присутствие большего количества частиц с морфологией отличной от цилиндрической, а ширина запрещенной зоны уменьшалась с 5.1 эВ до 3.6 эВ с увеличением содержания кобальта в системе.

Таким образом, введение различных d-элементов в структуру позволит создавать функциональные материалы с заданными свойствами на основе слоистых гидросиликатов.

Благодарности: Коллектив авторов благодарит Кириленко Д.А. за помощь в проведении ПЭМ-исследований, а также Жижина Е.В. и Королеву А.В. за выполнение РФЭС-исследований и Бодалева И.С. за исследование образцов методом спектроскопии диффузионного отражения

Литература:

[1] Khrapova E.K. et al. Thermal behavior of Mg− Ni-phyllosilicate nanoscrolls and performance of the resulting composites in hexene-1 and acetone hydrogenation // ChemNanoMat. – 2021. – Т.7. – №. 3. – С. 257-269.
[2] Krasilin A. A. et al. On an adsorption/photocatalytic performance of nanotubular $Mg_3Si_2O_5(OH)_4/TiO_2$ composite //Наносистемы: физика, химия, математика. – 2018. – Т. 9. – №. 3. – С. 410-416.
[3] Khrapova E. K. et al. Nanotubular nickel hydrosilicate and its thermal annealing products as anode materials for lithium ion batteries //Inorganic Materials. – 2020. – Т. 56. – №. 12. – С. 1248-1257.

СД-IV-58

Электронная структура би-интеркалированного $Fe_xNi_yTiSe_2$

Шкварин А.С.[1], Дьячков Е.Г.[1], Меренцов А.И.[1], Королева А.В.[2], Жижин Е.В.[2], Чумаков Р.Г.[3], Титов А.Н.[1]

1 – Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия

2 – Научно-исследовательский парк, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

3- Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Shkvarin@imp.uran.ru

Интеркалатные материалы на основе слоистых дихалькогенидов переходных металлов привлекают внимание с точки зрения возможности внедрения различных атомов или молекул в межслоевое пространство и модификации свойств исходного материала [1]. Одной из интересных особенностей таких материалов является наблюдение в них ретроградной растворимости, когда при нагреве фиксируется выделение внедренного металла. Ранее было изучено влияние внедрения железа и никеля по-отдельности на кристаллическую структуру и свойства $TiSe_2$. В обоих этих системах было обнаружено явление ретроградной растворимости, при этом железо и никель при выделении реагируют с халькогеном, формируя селениды [2,3]. Температуры выделения железа и никеля различны, что может быть использовано для направленного синтеза композита с требуемыми включениями. Изучение электронной структуры однородного би-интеркалатного соединения позволит понять, как происходит взаимодействие интеркалированных атомов друг с другом и с решеткой матрицей.

Экспериментальное исследование би-интеркалированной системы $Fe_xNi_yTiSe_2$ проводилось на монокристаллических образцах, выращенных из предварительного приготовленного $TiSe_2$ и атомарно чистых Fe и Ni. Монокристаллы $Fe_xNi_yTiSe_2$ были выращены в кварцевых ампулах методом газотранспортной реакции с использованием I_2 в качестве газа-носителя [4]. Химический состав выращенных монокристаллов оценивали методом EDX с использованием сканирующей электронной микроскопии.

Спектры фотоэлектронной спектроскопии XPS были получены на фотоэлектронном спектрометре Escalab 250Xi (Thermo Fisher Scientific), оснащенном источником монохроматического излучения AlKα (энергия фотонов 1486,6 эВ) в Ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Санкт-Петербургского университета.

Рентгеновские спектры поглощения (XAS) и спектры валентных полос в режиме резонансного возбуждения (ResPES) измерялись на экспериментальной станции NanoPES на Курчатовском источнике синхротронного излучения (Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва) [5].

ARPES изображения получены на экспериментальной станции ANTARES синхротрона Soleil (Франция). Энергия возбуждения составляла 95 эВ.

Все измерения проводились при комнатной температуре в сверхвысоком вакууме порядка 1×10^{-9} мбар на сколотых в вакууме образцах.

Концентрационных зависимостей в спектрах железа и никеля практически не наблюдается (вне зависимости от того, какой интеркалант меняет концентрацию). При этом наблюдается изменение спектров титана и селена. Изменение энергетического положения спектров свидетельствует о переносе заряда на решетку матрицу от интеркалированных атомов. При этом атомы наибольший перенос идет с атомов железа.

Спектры поглощения также демонстрируют слабое взаимодействие между атомами железа и никеля, при этом значительное изменение в спектрах титана.

В спектрах валентной полосы в резонансном Ti 2p-3d режиме возбуждения наблюдается две резонансных полосы вблизи уровня Ферми. Это соответствует резонансу отдельно от подсистем Fe_xTiSe_2 и Ni_xTiSe_2. Полученные ARPES изображения показывают, что эти зоны являются бездисперсионными.

Общий анализ спектров показывает, что атомы железа и никеля слабо взаимодействуют друг с другом, при этом наблюдается сильное взаимодействие с решеткой матрицей.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и правительства Свердловской области (проект № 24-23-20029, соглашение 5-25-МГ).

Литература:

[1] Titov A.N. et al. // J. Phys. Chem. Lett. 2018. V.9. p. 5183.
[2] Shkvarina E.G. et al. // J. Struct. Chem. Pleiades Publishing 2016. V. 57 pp. 710–716.
[3] Shkvarina E.G. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2024. V. 26. pp. 15999–16007.
[4] Rimmington H.P.B. et al. // J. Cryst. Growth. 1972. V.15 pp.51–56.
[5] Lebedev A.M., et al. // J. Surf. Investig. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2021. V.15. pp. 1039–1044.

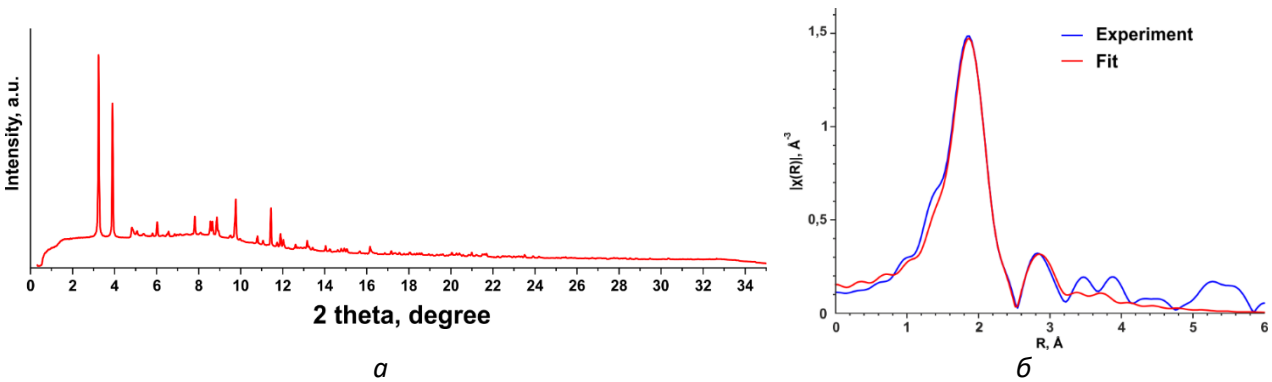
СД-IV-59

Электронная и пространственная структура УФ-Вид/ИК люминофоров по данным синхротронных методов

Шурыгин А.В.[1], Юдников Е.А.[1], Зубченко В.Б.[1], Немтинов В.И.[1], Зернов Я.Г.[1], Тригуб А.Л.[2]
1 – ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет», Владивосток, Россия
2 – НИЦ «Курчатовский институт, Москва, Россия
shurygin.av@dvfu.ru

Органические люминофоры на основе аддуктов комплексов лантанидов проявляют уникальные фотофизические свойства, которые определяются лигандным окружением и природой координационного иона лантанида [1,2]. Аддукты комплексов лантанидов находят исключительно широкое применение в современных технологиях благодаря своим уникальным люминесцентным свойствам, включая высокую квантовую эффективность, узкополосную эмиссию и длительные времена жизни возбужденного состояния. Эти характеристики делают их незаменимыми для создания функциональных материалов следующего поколения. Ключевой особенностью аддуктов комплексов лантанидов является их способность люминесцировать посредством так называемого "антенного эффекта": органические лиганды поглощают энергию возбуждения и передают её через внутримолекулярные процессы на резонансные уровни ионов лантанидов, что приводит к интенсивной люминесценции.

При синтезе аддуктов на основе лантаноидов возникают сложности с получение стабильного и подходящего размера кристалла, а иногда и вообще провести кристаллизацию. Так, комплексы европия с производными бензойной кислоты обладают интенсивной красной люминесценцией, растворяются только в ДМФА и других сильных полярных растворителях, но ни при каких условиях не образуются стабильного размера кристаллов. Аддукт комплекса трис-дибензоилметаната иттербия с лигандами Dipy, DPG, TPPO, HMPA имеют хорошую растворимость в этаноле, что позволяет изучать их свойства в растворе, однако, так же не удается провести кристаллизацию. Подобные ограничения усложнят определение пространственной структуры, а без нее полностью охарактеризовать молекулы и симметрию. Для аддукта $Yb(Dbm)_3(DPG)_2$ был получен спектр порошковой рентгеновской дифракции (рис. 1а) и спектр рентгеновского поглощения по L3-краю Yb (в R-пространстве на рис. 1б).



а *б*

Рис. 1. Спектр порошковой рентгеновской дифракции (а), спектр рентгеновского поглощения (б)

Расшифровка порошковой дифракции в большинстве случаев остается невозможной, однако подгонка модели к спектру рентгеновского поглощения позволила определить локальную атомную структуру иона иттербия и доказать координации двух молекул 1,3-дифенилгуанидина.

Подобные эксперименты в совокупности с фотоэлектронной спектроскопией делают возможны доказательства координации лигандов в аддуктах, подтвердить теоретическую модель и провести моделирование электронной структуры (рис. 2).

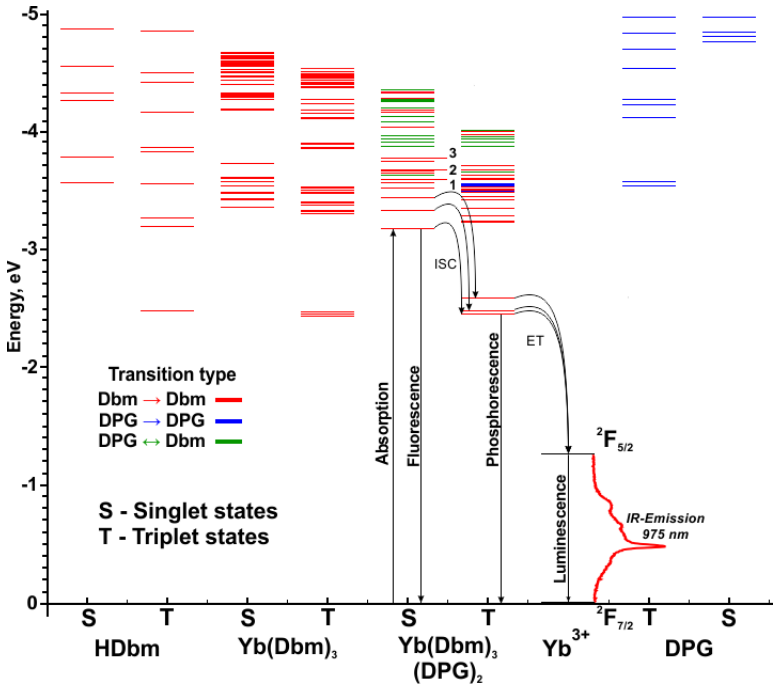


Рис. 2. Энергетическая диаграмма синглетных и триплетных возбужденных состояний аддукта Yb(Dbm)3(DPG)2

Экспериментальные методы в основе которых лежит синхротронное излучение, позволяет решать задачи фотохимии на принципиально новом уровне, а с развитием и большей доступности «мегаустановок» в отдельных регионах, таких как Дальний Восток, позволит решить множество «спящих» задач и продолжить некогда отложенные исследования.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZNS-2024-0013).

Литература:

[1] Shurygin A.V., Vovna V.I., et al // Spectrochimica Acta Part a Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2021, 250, 119397.

[2] Shurygin, A. V., Korochentsev V.V, et al // *Journal of Structural Chemistry, 2023, V. 64, I. 12, P. 2404-2416*

СД-IV-60

Исследование методами рентгеновского кругового дихроизма и ПЭМ литых и закаленных сплавов $Fe_{50}Nd_{50}$

Менушенков В.П.[1], Менушенков А.П.[2], Щетинин И.В.[1], Иванов А.А.[2], Рогалев А.Л.[3], Савченко А.Г.[1], Жуков Д.Г.[1]

1 – Университет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия

2 – Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия, Москва, Россия

3 – Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), CS40220, F-38043 Гренобль, Cedex 9, Франция

ingvar@misis.ru

Сплавы системы Fe-Nd представляют значительный интерес в связи с ключевой ролью межзеренных фаз, обогащенных Nd, в формировании высокой коэрцитивной силы в спеченных магнитах на основе Nd-Fe-B. В литых Nd-обогащенных сплавах была обнаружена корреляция между высокими значениями коэрцитивной силы и метастабильной эвтектической микроструктурой, содержащей твердую магнитную фазу (A_x) с неидентифицированной структурой и составом. Механизм формирования этой фазы и взаимосвязь структуры со свойствами остаются невыясненными. Изучение намагниченности сплавов Fe-Nd осложнено наличием нескольких магнитных фаз. В связи с этим целью данного исследования являлись исследования магнитных фазы в литом и закаленном с высокой скоростью сплаве $Fe_{50}Nd_{50}$ методами рентгеновского магнитного кругового дихроизма (XMCD) и определить их вклад в процесс намагничивания этих сплавов.

Исходный сплав $Fe_{50}Nd_{50}$ был выплавлен из чистых металлов в дуговой печи в атмосфере аргона. Быстро закаленные ленты были получены методом плавления с закалкой на вращающемся медном диске со скоростью ~40 м/с. Фазовый состав исследовался методом рентгенофазового анализа (РФА). Микроструктура изучалась с помощью сканирующей (СЭМ) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Измерения магнитных свойств проводились на установке измерения физических величин PPMS (Physical Property Measurement System) в полях до 9 Тл. Исследования XMCD проводились на пучковой линии ID12 Европейского центра синхротронного излучения (ESRF) в Гренобле, Франция. XMCD-спектры регистрировались на краях поглощения K-Fe (7113 эВ) и $L_{2,3}$-Nd (6725 эВ) в режиме регистрации полного флуоресцентного выхода в магнитных полях до 17 Тл и при температурах 5 и 50 К. Дополнительно были измерены так называемые XMCD-кривые намагничивания (элемент-селективные петли гистерезиса) путем фиксации величины XMCD-сигнала при энергии фотона, соответствующей основному максимуму, в зависимости от приложенного магнитного поля.

Рентгенофазовый анализ показал, что литой образец состоит из 40% Nd ($P6_3/mmc$) и 60% Nd_2Fe_{17} (R-3m), в то время как у ленты пики дифракции размыты и присутствует аморфный фон, что указывает на структурное измельчение и частичную аморфизацию. СЭМ-микрофотографии выявили, что микроструктура литого образца состоит из первичных зерен фазы Nd_2Fe_{17}, окруженных оболочкой, обогащенной Nd, с эвтектической областью между

ними, в то время как лента демонстрирует однофазную гомогенную микроструктуру. ПЭМ-исследования ленты выявили наличие аморфоподобных областей с нанокристаллами неизвестных фаз размером 5–10 нм, что указывает на распад аморфной матричной фазы. Элемент-селективные XMCD-петли гистерезиса для закаленного сплава показали практически идентичное значение коэрцитивной силы для краев L_2-Nd и K-Fe, которое практически не зависит от температуры. Петля на краю K-Fe является суммой вкладов Fe-содержащих фаз. Основная Fe-обогащенная фаза имеет высокую $\mu_0 H_c \approx 2{,}4$ Тл и является высокоанизотропной. Отсутствие насыщения петли на краю K-Fe в поле до $\mu_0 H = 17$ Тл указывает на присутствие второй Nd-обогащенной фазы Nd-Fe, которая является ферромагнитной при температурах ниже 50 К. Петля на краю L_2-Nd с $\mu_0 H_c \approx 1{,}9$ Тл является суммой вкладов двух Nd-содержащих фаз: твердой Fe-обогащенной фазы ($\mu_0 H_c \approx 2{,}4$ Тл) и матричной фазы Nd-Fe средней твердости с $\mu_0 H_c \approx 1{,}3$ Тл (рисунок 1). Нормированная макроскопическая петля гистерезиса показала более высокое значение $\mu_0 H_c = 4{,}7$ Тл по сравнению с XMCD-петлями. Это расхождение может быть вызвано тем, что макроскопическая петля характеризует перемагничивание объема сплава, в то время как XMCD-сигнал собирается с тонкого поверхностного слоя толщиной 5–10 мкм, который содержит множество дефектов, снижающих анизотропию и коэрцитивную силу.

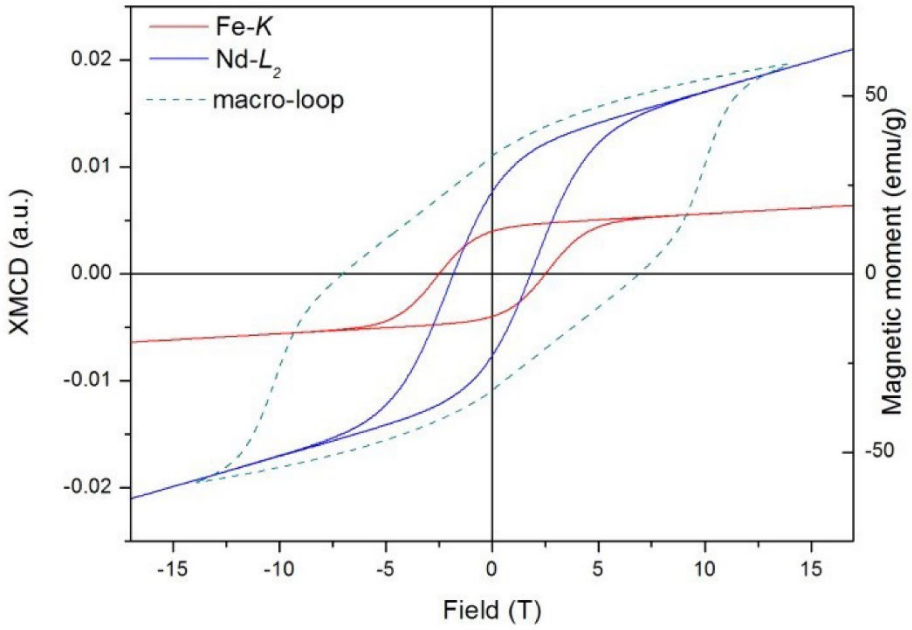


Рис. 1. Макроскопическая петля гистерезиса для литого образца $Fe_{50}Nd_{50}$ в сравнении с петлями гистерезиса, полеченными методом XMCD, измеренными на краях L_2-Nd и K-Fe при 5 К

СД-IV-61

Структура и свойства покрытий на основе $Al_xCoCrFe_{0,2}Ni$ с добавкой частиц Cr_3C_2, полученных методом вневакуумной электронно-лучевой наплавки

Юргин А.Б., Руктуев А.А.
Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
yurgin2012@yandex.ru

Исследовано влияние концентрации алюминия (x = 0,1; 0,3; 0,5) в матричном сплаве $Al_xCoCrFe_{0,2}Ni$ и добавки карбида хрома (5 и 10 вес. % Cr_3C_2) на фазовый состав, структуру, механические свойства и жаростойкость покрытий, полученных методом вневакуумной электронно-лучевой наплавки. Установлено, что оптимальным сочетанием свойств характеризуется композиционное покрытие на основе сплава $Al_{0,3}CoCrFe_{0,2}Ni$ с 5 вес. % Cr_3C_2.

Высоко- и среднеэнтропийные сплавы, в частности система $Al_xCoCrFeNi$, являются перспективной матрицей для формирования защитных покрытий ввиду уникального сочетания механических свойства. Введение тугоплавких карбидных частиц позволяет целенаправленно повышать твердость и износостойкость. Целью работы является изучение структуры и комплекса свойств наплавленных покрытий системы $Al_xCoCrFeNi$, упрочненных частицами карбида хрома.

Покрытия получали методом вневакуумной электронно-лучевой наплавки порошковой смеси металлических порошков на стальной основе. Электронно-лучевая наплавка покрытий проводилась с использованием уникальной научной установки на базе промышленного ускорителя электронов ЭЛВ-6, созданной специалистами Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН.

Исследовали матричные составы $Al_xCoCrNi$ (x = 0,1; 0,3; 0,5) с целью выбора оптимальной концентрации алюминия. На основании методов дифракции синхротронного излучения было установлено, что при x=0,1 и 0,3 покрытия имеют однофазную ГЦК структуру. При x=0,5 фиксируется наличие рефлексов с низкой интенсивностью, соответствующих ОЦК-фазе. Параметр ГЦК решетки закономерно увеличивался с ростом x: от 3,560 Å (x=0,1) до 3,586 Å (x=0,5).

Наплавленные покрытия характеризуется дендритным строением и наличием междендритных выделений, обогащенные Al и Ni. Рост содержания Al с 0,1 до 0,5 моль привел к монотонному увеличению микротвердости с 228±4 $HV_{0,1}$ до 311±5 $HV_{0,1}$. Износостойкость при этом снизилась с 0,16±0,04 до 0,24±0,10 $\cdot 10^{-3} \frac{мм^3}{Н \cdot м}$ ввиду снижения пластичности и образования трещин. Наибольшей жаростойкостью характеризовался сплав $Al_{0,3}CoCrFe_{0,2}Ni$ (прирост массы 2,6 г/м²), в то время как для состава $Al_{0,5}$ прирост составил 6,5 г/м² из-за нарушения сплошности оксидной пленки сеткой трещин.

Введение частиц карбида хрома Cr_3C_2 в состав порошковой смеси $Al_{0,3}CoCrNi$ привел к формированию карбидных кристаллов Cr_7C_3, выделяющихся в виде дисперсных частиц субмикронного размера при 5 вес. % и более крупных агломератов при 10 вес. % добавки. Введение карбидных частиц привело к измельчению зерна и снижению степени текстурированности. Добавка 5 и 10 вес. % Cr_3C_2 существенно повысила микротвердость с

277±5 $HV_{0,1}$ у матрицы до 354±5 и 455±6 $HV_{0,1}$ соответственно. Испытание на абразивный износ выявило немонотонную зависимость: добавка 5 вес. % Cr_3C_2 повысила износостойкость на 12,6 % относительно матрицы, тогда как введение 10 вес. % снизила её на 21,9 %. Наибольшая жаростойкость была достигнута при 5 вес. % Cr_3C_2 (прирост массы 1,45 г/м^2), что объясняется формированием сплошной защитной оксидной пленки на основе Al и Cr.

Таким образом оптимальным матричным сплавом для наплавки является $Al_{0,3}CoCrNi$, комбинирующий высокую твердость, достаточную пластичность и наилучшую жаростойкость. В процессе наплавки происходит плавление стальной основы и вмешивание железа в ванну расплава, что приводит к формированию покрытия с составом $Al_{0,3}CoCrFe_{0,2}Ni$. Карбид хрома выделяется в виде карбида Cr_7C_3, обеспечивая дисперсионное упрочнение и измельчение зерна. Максимальный прирост твердости обеспечивает добавка 10 вес. % Cr_3C_2. Оптимальное сочетание механических свойств и жаростойкости характерно для композиционного покрытия $Al_{0,3}CoCrFe_{0,2}Ni$ с 5 вес. % Cr_3C_2.

Благодарности: исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания FSUN-2024-0005 "Структурные преобразования в тонких поверхностных слоях металлических сплавов при экстремальных термических и деформационных воздействиях". Микроструктурные исследования проводились на оборудовании профильного центра "Структура, механические и физические свойства материалов" (НГТУ).

Литература:

[1] Miracle, D. B., & Senkov, O. N. (2017). A critical review of high entropy alloys and related concepts. Acta Materialia, 122, 448–511.

[2] Torralba, J. M. High-entropy alloys fabricated via powder metallurgy. A critical review / J. M. Torralba, P. Alvaredo, A. García-Junceda // Powder Metallurgy. – 2019. – Vol. 62. – № 2. – P. 84-114.

СД-V-01

Кристаллизация и предварительный рентгеноструктурный анализ рекомбинантного апоферритина мыши

Бережная О.М.[1], Власкина А.В.[2], Самыгина В.Р.[2]
1 – НИТУ МИСиС, Москва, Россия
2 – НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия
berezhol@mail.ru

Ферритин – железосодержащий крупный макромолекулярный комплекс, состоящий из 24 субъединиц, представляющий интерес в качестве основы для средств целенаправленного транспорта и контролируемого высвобождения активных веществ. За счёт своей структуры апоферритин позволяет проникать малым молекулам через поры размером 3-5 Å. У млекопитающих ферритин состоит из субъединиц двух типов. Для решения конкретных задач модификации белка при биотехнологических разработках можно подбирать его H- и L-субъединицы из различных организмов. Это позволяет оптимизировать свойства белка для определенных условий, например, для стабильной работы при разных pH.

Объектом исследования был рекомбинантнный апоферритин мыши, состоящий только из H-субъединицы. Белок, экспрессированный в *E. Coli,* кристаллизовали методом диффузии в парах в разных кристаллизационных условиях при pH 7.5 и 9.0. Подбор концентраций белка и осадителя являлся необходимым этапом. Кристаллы формировались в течение 2–3 недель. Первоначально, с использованием хлорида магния [1] в качестве осадителя были выращены кристаллы, относящиеся к кубической пространственной группе F432. Использование других условий [2] позволило получить кристаллы, принадлежавшие к пространственной группе I4. С полученных кристаллов были собраны наборы дифракционных данных с использованием синхротронного излучения на станции Белок-РСА КИСИ-Курчатов. Кристаллы, принадлежавшие к тетрагональной сингонии демонстрировали лучшую дифракцию и рассеивали до 1.8Å. Подобранные условия были трансформированы для выращивания кристаллов в условиях микрогравитации, так как белок является хорошим модельным объектом для тестирования аппаратуры для проведения контролируемой кристаллизации белков в космосе. Была разработана лабораторная модель для кристаллизации методом диффузии в парах (вариант сидячая капля). В ходе подбора условий для кристаллизации методом сидячей капли были увеличены объемы как капли, так и самой ячейки. Также были проведены эксперименты по кристаллизации методом встречной диффузии, в ходе которого варьировались концентрации как белка, так и осадителя. Эксперименты позволили вырастить монокристаллы большего размера. В настоящий момент, с использованием полученных экспериментальных параметров проводится эксперимент по выращиванию кристаллов апоферритина обеими методами в условиях микрогравитации на МКС. После завершения кристаллизации и возвращения аппаратуры на Землю планируется проведение рентгеноструктурного анализа с использованием станции Белок-РСА КИСИ-Курчатов.

Благодарности: Выделение и очистка белка выполнены в рамках госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

Литература:

[1] Ferraro G., Ciambellotti S., Messori L., Merlino A. // Inorg Chem. 2017. T.56, №15. C.9064–9070.
[2] Toussaint L., Bertrand L., Hue L., Crichton R.R., Declercq J.-P. // Journal of Molecular Biology. 2007. T.365, №2. C.440–452.

СД-V-02

Анализ взаимодействия критических аминокислотных остатков в активном центре эндонуклеазы VIII с основанием напротив повреждения в ДНК

Булгаков Н.А.[1,2], Ендуткин А.В.[1], Шевцов М.Б.[3], Капранов И.А.[3], Юдкина А.В.[1], Борщевский В.И.[3], Жарков Д.О.[1,2]

1 – Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия

3 — Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия

bulgakov@1bio.ru

ДНК живых организмов находится под постоянным воздействием экзогенных и эндогенных факторов, что приводит к повреждениям ДНК. Наиболее распространенные повреждения в клетке — окисленные основания ДНК, такие повреждения эффективно исправляются системой эксцизионной репарации оснований (ЭРО) [1]. ЭРО — многостадийный мультиферментный процесс, на первом этапе которого ключевые ферменты— ДНК-гликозилазы, узнают и удаляют поврежденное основание, гидролизуя *N*-гликозидную связь между поврежденным основанием и сахарофосфатным остовом ДНК.

Одна из основных ДНК-гликозилаз бактериальной клетки — эндонуклеаза VIII (Nei), которая узнает и удаляет из ДНК окисленные гетероциклические основания пиримидинового ряда (тимингликоль, дигидротимин, 5-гидроксицитозин и др.), а также проявляет активность на окисленных пуринах (8-оксогуанин, 2,6-диамино-4-гидрокси-5-N-метилформамидопиримидин).

В активном центре Nei *E. coli* находятся высококонсервативные аминокислотные остатки важные как для катализа удаления поврежденного основания (Pro1, Glu2), взаимодействия с заряженным сахарофосфатным остовом ДНК (Lys52, His67, Arg90, Ser104, Gln160 и др.), так и для взаимодействия с основанием напротив повреждения в молекуле ДНК (Gln69, Leu70, Tyr71) [2].

В базе данных кристаллических структур белков (Protein Data Bank) представлена лишь 1 структура комплекса Nei *E. coli* и ДНК, где напротив повреждения находится аденин (Nei-X:A, PDB: 1K3W) [2]. Несмотря на это, физико-химические параметры удаления из олигомерной молекулы ДНК тимингликоля, дигидроурацила и 8-оксогуанина напротив всех 4-х оснований ДНК показывают, что хуже всего удаляется повреждение напротив аденина [3].

Впервые в мире были получены ДНК-белковые кристаллы Nei *E. coli* и ДНК, где напротив повреждения находится цитозин (Nei-X:C), гуанин (Nei-X:G) или тимин (Nei-X:T). Дифракционные данные получены на Шанхайском источнике синхротронного излучения (SSRF). Кристаллические структуры были разрешены до 1,75 Å для Nei-X:C, 1,85 Å для Nei-X:G и 1,80 Å для Nei-X:T.

Изначально было выдвинуто предположение, что, как и в опубликованной структуре с аденином напротив повреждения, Gln69 будет образовывать водородные связи и с другими

нативными основаниями. Однако, при разрешении кристаллической структуры оказалось, что когда пиримидиновое основание было расположено напротив повреждения, то оно было повернуто на 180° вокруг *N*-гликозидной связи, находясь в *син*-конформации, в результате чего атомы пиримидинового кольца, которые потенциально могут образовывать водородные связи находился со стороны большой бороздки ДНК, не взаимодействуя с ферментом.

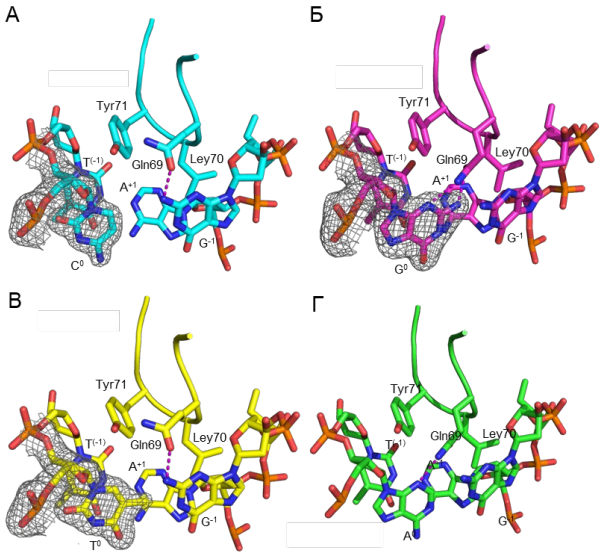


Рис. 3. Взаимодействие Nei E. coli с удаленным нуклеотидом. А–Г — крупный план удаленного нуклеотида и петли ^{69}QLY^{71} в комплексах: А — Nei-X:C, голубым, Б —Nei-X:G, пурпурным, В — Nei-X:T, желтым и Г — Nei-X:A, зеленым [2]

На основании того, что у пиримидинов напротив повреждения грань C5=C6 ориентирована внутрь спирали ДНК, было выдвинуто предположение о снижении активности Nei *E. coli* при наличии более объемного заместителя, чем метильная группа у тимина. Для проверки этой гипотезы, была измерена активность Nei *E. coli* на субстратах, содержащих напротив повреждения T или 2 аналога урацила с объемными заместителями у C5 атома: 5-этинилуроацил (EtU) и 5-(окта-1,7-диин-1-ил)-урацил (C8-AlkU). Кинетические данные, полученные на субстратах с модифицированными пиримидинами по C5 положению напротив повреждения, свидетельствовали об ухудшении катализа удаления поврежденного основания прямопропорционально увеличению алифатического радикала со стороны C5=C6 связи такого пиримидина, что подтвердило выдвинутое предположение.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке РНФ (проект 21-64-00017р) и программе Приоритет-2030 для Новосибирского Государственного Университета, а также при частичной поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект 125012300657-2).

Литература:

[1] Zharkov D. Base excision DNA repair // Cell. Mol. Life Sci. – 2008. – V. 65. – No. 10. – P. 1544-1565.
[2] Zharkov D., Golan G., Gilboa R., Fernandes A., Gerchman E., Kycia H., Rieger A., Grollman P., Shoham G. Structural analysis of an Escherichia coli endonuclease VIII covalent reaction intermediate // The EMBO journal. – 2002. – V. 21. – No. 4. – P. 789-800.
[3] Kropachev K. Y., Zharkov D. O., Grollman A. P. Catalytic mechanism of Escherichia coli endonuclease VIII: roles of the intercalation loop and the zinc finger // Biochemistry. – 2006. – V. 45. – No. 39. – P. 12039-12049.

СД-V-03

Применение рентгеновской микротомографии в космической биологии: проблемы и перспективы

Гулимова В.И.[1], Букреева И.Н.[2], Юнеман О.А.[1], Бузмаков А.В.[3], Кривоносов Ю.С.[3], Асадчиков В.Е.[3], Савельев С.В.[1]

1 – НИИ Морфологии человека имени академика А.П. Авцына ФГБНУ «Научный российский центр хирургии имени академика В.Б.Петровского», Москва, Россия

2 – Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

3 – НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

gulimova@yandex.ru

Рентгеновская микротомография (РМКТ) представляет собой бесценный метод для исследования биоматериала после продолжительных орбитальных экспериментов. Не только из-за общеизвестных проблем, связанных с деминерализацией костей скелета, которые возникают у человека и большинства экспериментальных животных в невесомости. Космический биоматериал уникален, а количество и объём образцов обычно очень ограничены, поэтому крайне важно то, что РМКТ с одной стороны даёт возможность получения высококачественных 3D изображений с субмикронным разрешением, с другой - оставляет образцы доступными для последующего гистологического, иммуногистохимического и других методов исследования.

Образцы тканей позвоночных после космических полётов (КП) разной продолжительности анализируются нами с помощью рентгеновской микротомографии, гистологии и иммуногистохимии уже 20 лет: спутники «ФОТОН-М2» (2005г, 16-суточный КП), «ФОТОН-М3» (2007г, 12-сут. КП), «БИОН-М1» (2013г, 30-сут. КП). Объектами изучения в основном были нагруженные и ненагруженные при земной гравитации кости хрящепалых гекконов (ХГ): разные отделы позвоночника, плечевые и бедренные кости, большая и малая берцовые кости, нижняя челюсть, фаланги пальцев передних конечностей, проксимальные хвостовые позвонки (12-30-сут. КП) [1, 2]. Также были исследованы плечевые кости монгольских песчанок (МП, 12-сут. КП) [3] и проксимальные хвостовые позвонки мышей (30-сут. КП). В начале работы мы использовали преимущественно метод РМКТ на лабораторных источниках рентгеновского излучения, таких как микротомограф «TOMAC» (НИЦ Курчатовский институт). В дальнейшем появилась возможность исследовать наши объекты на синхротронных источниках (ESRF, DESY PETRA III, PSI, Diamond) с фазовым контрастом (РФКТ), анализируя не только кости скелета, но и мягкие ткани.

У МП после 12-суточного КП применение РМКТ показало уменьшение объёма плечевой кости в среднем на 9,0%, а коэффициента линейного поглощения на 4.2%. При этом максимальное уменьшение объёма было выявлено в корковой части проксимального эпифиза и диафиза, а коэффициента поглощения - в эпифизах [3].

При изучении перечисленных выше костей скелета ХГ с помощью РМКТ мы не выявили значимых изменений объёма и коэффициента поглощения после КП по сравнению с контролем [1]. Но применение РФКТ показало, что объем минерализованного хряща нотохордальной перегородки в проксимальных позвонках и его объемная доля достоверно

снизились после КП более чем на 70%. С другой стороны, в полётной группе обнаружен значимый рост объема кости для интерцентров. Таким образом, благодаря адекватному выбору объекта и применению РФКТ нам впервые удалось выявить изменения в костях скелета ХГ после 30-суточного КП [2].

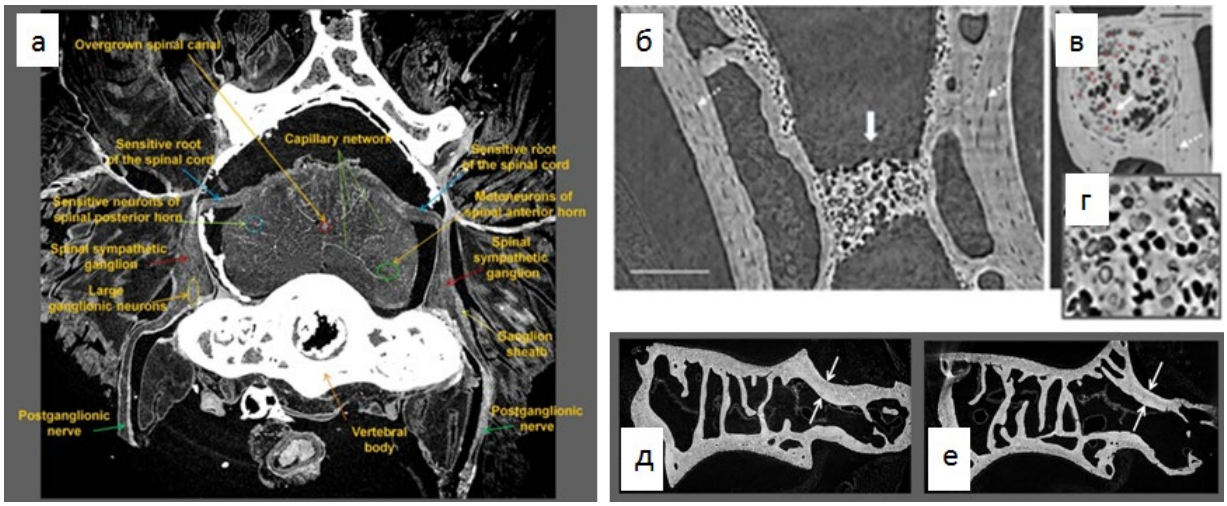


Рис. 1. а – поперечное сечение позвонка ХГ: спинной мозг, тело позвонка и прилегающие мягкие ткани; б-г – минерализованная хрящевая перегородка позвонка ХГ; д-е – поперечное сечение плечевой кости МП: д – контроль, е – после 12-суточного космического полёта.

В связи с осуществлённым в 2025г запуском биоспутника БИОН-М2 возникает множество актуальных задач, требующих для своего решения РФКТ с субмикронным разрешением. Среди них исследования изменений нейронов головного и спинного мозга, хондроцитов и остеоцитов, а также их лакун. Однако в настоящее время зарубежные синхротроны недоступны для российских учёных. Сотрудничество с иностранными исследователями для совместного изучения космических образцов также зачастую оказывается невозможным. Планируемое введение в эксплуатацию отечественного синхротрона СКИФ позволяет надеяться на решение этих проблем и значительный прогресс в космической биологии.

Благодарности: Работа проведена в рамках выполнения гос. задания РНЦХ «Морфологические аспекты взаимосвязи клеточных нарушений в нервной и эндокринной системах, возникающее при заболеваниях, ассоциированных со старением, а также в рамках выполнения гос. задания НИЦ «Курчатовский институт» в части проведения измерений и в рамках Соглашения № 075-15-2025-458 с Министерством науки и высшего образования РФ в части обработки фазоконтрастных изображений.

Литература:

[1] Gulimova V., Proshchina A., Kharlamova A. et al. // Int. J. Mol. Sci. 2019, V.20, N.12, P.3019.
[2] Bukreeva, I.; Gulimova, V.I.; Krivonosov, Y.S. et al. // Cells. 2023, V.12, P.2415.
[3] Krivonosov Y.S., Gulimova V.I., Buzmakov A.V. et al. // Front. Physiol. 2021, V.12, P.752893.

СД-V-04

Подходы к получению безводных твердых форм противовирусных соединений на примере противооспенного препарата тековиримата

Ивлев А.А.[1,2], Колыбалов Д.С.[1,2], Архипов С.Г.[1,2]
1 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
2 – ЦКП «СКИФ», Кольцово, Россия
a.ivlev1@g.nsu.ru

Соединения, проявляющие активность, нередко способны существовать в виде гидратов. Водородные связи, образующиеся между молекулами действующего соединения и воды, приводят к образованию новых твердых формы, которые отличаются друг от друга физическими свойствами. Таким образом, для фармацевтической промышленности существует необходимость в поиске и идентификации как безводных, так и гидратированных твердых форм, а также разработке способов их воспроизводимого получения.

Примером противовирусного препарата, для которого характерно образование гидратов, является тековиримат (ST-246, торговое название TPOXX, рис. 1), активный в отношении ортопоксвирусов [1]. Из патентных заявок известно, что тековиримат существует в виде шести твердых форм, из которых две являются моногидратами (формы I и III), три – безводными формами (формы II, IV и VI) и одна – полугидратом (форма V) [2]. Наличие воды в атмосфере и растворителях усложняет процесс получения безводных твердых форм.

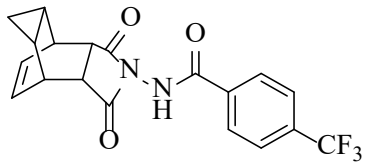


Рис. 1. Структурная формула тековиримата

В рамках исследования проводился поиск условий кристаллизации безводных твердых форм тековиримата. Было обнаружено, что малейшее присутствие воды как в растворе, так и в атмосфере приводит к осаждению гидратированных твердых форм. Для решения этой проблемы был предложен ранее не использовавшийся подход, заключающийся в добавлении молекулярных сит с диаметром пор 3Å непосредственно в раствор тековиримата и осаждение путем выпаривания растворителя в эксикаторе с низкой влажностью воздуха. Описанный способ позволил воспроизводимо выделить пригодные для монокристального рентгеноструктурного анализа (РСА) кристаллы безводных твердых форм тековиримата. Для ослабления требований к влажности реагентов и увеличения массы загрузок был предложен новый способ получения безводных форм тековиримата. Раствор тековиримата кипятился в органическом растворителе с насадкой Дина-Старка (рис. 2). В ходе кипячения растворитель образовывает азеотропную смесь с водой и удаляется из колбы, после чего смесь вода-растворитель конденсируется на стенках обратного холодильника и стекает в наполненный молекулярными ситами отвод насадки Дина-Старка. Вода сорбируется молекулярными ситами, обезвоженный растворитель стекает назад в колбу. Таким образом достигается удаление воды из кристаллизационного раствора. После завершения этапа кипячения

растворитель быстро отгоняется при пониженном давлении и на дне колбы осаждается безводная твердая форма тековиримата.

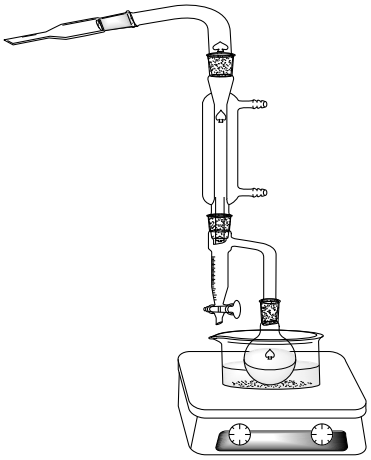


Рис. 2. Схема установки, используемая для получения безводных твердых форм

Методом порошковой рентгеновской дифракции проводилась оценка фазового состава продуктов кристаллизации. Было показано, что предложенные методики позволяют получать безводные твердые формы тековиримата.

Благодарности: Работа была частично выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП ""СКИФ"" ИК СО РАН (FWUR-2024-0040). Данная работа также частично выполнена при поддержке Программы «Приоритет-2030» НГУ, в рамках стратегического проекта «Центр интеграции персонифицированной биомедицины, фармации и синхротронных, бинарных технологий».

Литература:

[1] Yang G. et al. An Orally Bioavailable Antipoxvirus Compound (ST-246) Inhibits Extracellular Virus Formation and Protects Mice from Lethal Orthopoxvirus Challenge // J Virol. American Society for Microbiology, 2005. Vol. 79, № 20. P. 13139–13149.
[2] Tyavanagimatt S.R. et al. Polymorphic forms of ST-246 and methods of preparation. Google Patents, 2016.

СД-V-05

Визуализация внутриклеточного накопления гадолиний-содержащего контрастного вещества в глиоме с помощью рентгеновской микротомографии

Каханова В.Д.[1,2], Кошманова А.А.[1,2], Лузан Н.А.[1,2], Кичкайло А.С.[1,2], Коловская О.С.[1,2], Гаркуша Т.А.[2], Грек Д.С.[2], Морячков Р.В.[1], Заблуда В.Н.[3], Гогин А.А.[4]

1 – ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

2 – ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, Красноярск, Россия

3 – Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

4 – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

viktoriia.fedotovskaia@gmail.com

Глиомы являются наиболее распространенными и агрессивными первичными опухолями головного мозга, характеризующимися инфильтративным ростом и образованием отдаленных отсевов [1]. Главным методом диагностики является контрастное усиление на магнитно-резонансной томографии (МРТ), обусловленное нарушением гематоэнцефалического барьера (ГЭБ) и накоплением гадолиний-содержащих препаратов [2]. Однако детальное распределение контрастного агента на клеточном уровне, включая зоны инвазии и вторичные очаги, остается недостаточно изученным. Целью данной работы была визуализация и анализ пространственного распределения коммерческого МРТ-контрастного препарата в ткани глиомы с высоким разрешением.

Для визуализации использовали мышиную модель с ранее перевитой человеческой глиальной опухолью мышам с лекарственной иммунносупрессией. Мышам внутрибрюшинно вводили коммерческий препарат гадолиния в стандартной дозировке. Через 3 минуты после инъекции извлекали мозг, небольшой фрагмент опухоли с окружающими ее здоровыми тканями фиксировали в 10% нейтральном забуференном формалине в течение часа с последующей заливкой в парафиновые блоки. Измерения проводились на станции РТ-МТ в НИЦ «Курчатовский институт». Для детекции гадолиния использовали рентгеновскую микротомографию парафиновых срезов, что позволило визуализировать распределение гадолиния с высоким пространственным разрешением.

РТ-МТ визуализация выявила четкое контрастирование как основной массы опухоли, так и ее отсевов, подтверждая проникновение и накопление препарата даже в единичных в глиальных клетках, удаленных от основной опухолевой массы (Рис. 1). Интенсивный рентген-контрастный сигнал был ассоциирован непосредственно с цитоплазмой опухолевых клеток. При этом ядра клеток не проявляли значимого сигнала, что указывает на специфическое внутриклеточное накопление агента. В структуре опухоли были четко идентифицированы линейные неподсвеченные полости, интерпретированные как кровеносные сосуды (показаны желтыми стрелками). Отсутствие их контрастирования свидетельствует о полном вымывании препарата из сосудистого русла к моменту фиксации ткани. Важным результатом является визуализация на полученных изображениях вторичных опухолевых отсевов, удаленных от основного узла (показаны красными стрелками). Данные образования также

демонстрируют интенсивное внутриклеточное накопление контрастного агента, что указывает на сохранение механизмов его захвата даже в мелких инфильтративных очагах и возможности визуализации этого процесса.

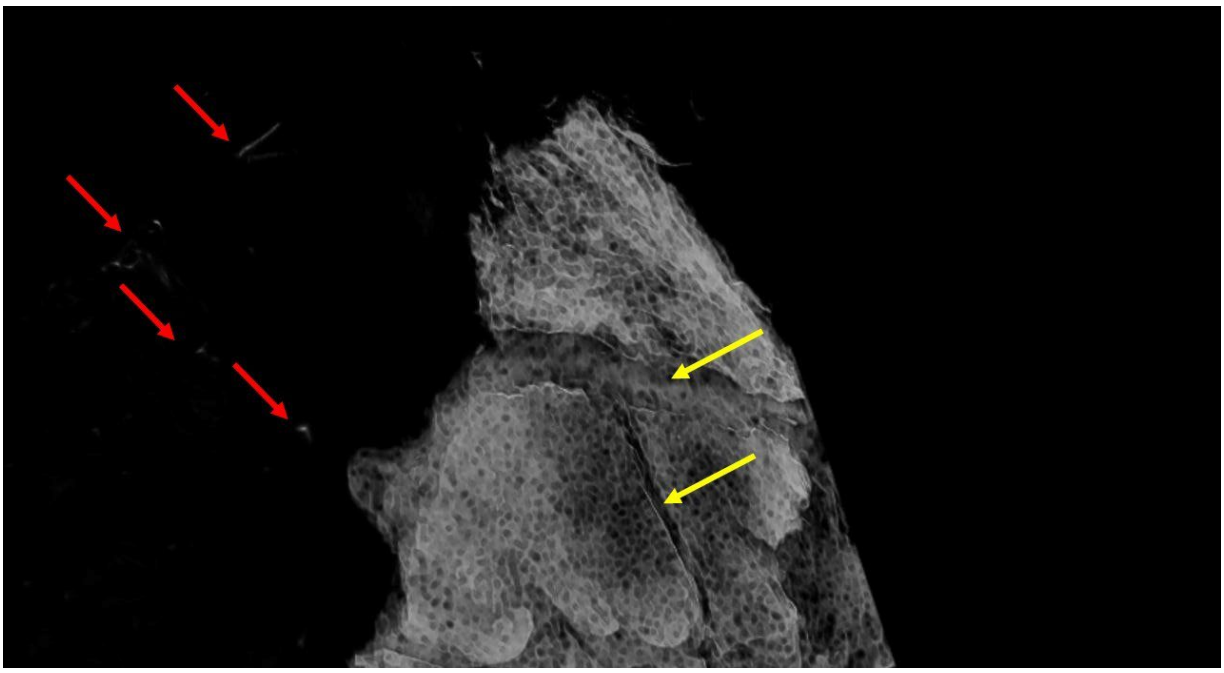


Рис. 1. Распределение контрастного агента в ткани глиомы и опухолевых отсевах по данным рентгеновской микротомографии. Красными стрелками показаны опухолевые отсевы, желтыми – кровеносные сосуды.

Таким образом, метод PT-MT применим для высокоточного детектирования и анализа распределения гадолиний-содержащих контрастных агентов в биологических тканях *ex vivo*, включая опухолевые отсевы. PT-MT представляет собой инструмент для доклинической оценки контрастных препаратов, позволяя с высоким разрешением оценивать специфичность их накопления в целевых тканях и эффективность преодоления биологических барьеров.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 25-72-20052.

Литература:

[1] Ferlay J. et al. Cancer incidence and mortality patterns in Europe: Estimates for 40 countries and 25 major cancers in 2018 // European journal of cancer. — 2018. — Т. 103. — С. 356—387.
[2] Upadhyay N., Waldman A. D. Conventional MRI evaluation of gliomas //The British journal of radiology. – 2011. – Т. 84. – №. special_issue_2. – С. S107-S111.

СД-V-06

Изучение структуры белков методом малоуглового рассеяния: от растворов к твердому телу (Sorb SAXS)

Ларичев Ю.В.[1,2,3]

1 – Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия.

2 – Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия.

3 – ЦКП «СКИФ» Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия

ylarichev@gmail.com

Метод рентгеновского малоуглового рассеяния (МУРР) является одним из наиболее информативных для получения данных о структуре белков в растворах [1]. В настоящее время наблюдается тенденция использования для МУРР все более ярких пучков синхротронного излучения (СИ), что позволяет ускорять как рутинные исследования для определения структуры биополимеров, так и проводить различные времяразрешенные эксперименты для идентификации отдельных белковых структур в сложных смесях (SEC SAXS). Тем не менее, сдерживающим фактором в данном случае является увеличение радиационных повреждений белковых структур при использовании высокоинтенсивных пучков СИ. Для предотвращения радиационных повреждений используют различные добавки в белковые растворы, в частности глицерин. Но из-за более высокой плотности добавок увеличивается и контраст растворителя, что приводит к уменьшению чувствительности МУРР. Таким образом возникает определенный предел эффективного использования ярких источников СИ для малоугловых исследований биополимеров в растворах. Одним из альтернативных путей преодоления данного ограничения является переход от растворов биополимеров к их адсорбированным формам на пористых носителях. В таком варианте проведения экспериментов исчезает водная среда, что с одной стороны существенно повышает чувствительность МУРР за счет отсутствия контраста от растворителя, и одновременно возрастает стойкость белков к радиационным повреждениям, поскольку основной причиной их появления является радиолиз воды. Таким образом изменение агрегатного состояния образца позволяет существенно улучшить возможности метода. Кроме того, использование широкого спектра пористых носителей с возможностью их различной модификации позволяет локализовывать на их поверхности и проводить структурную характеризацию не только изолированных мономеров белка, но и их олигомеров.

В работе будет представлена основная концепция предлагаемого подхода (Sorb SAXS) и показаны примеры такой структурной характеризации мономеров и олигомеров белков на примере альбумина, лизоцима и липазы.

Благодарности: Работа была выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0040).

Литература:

[1] Da Vela S. and Svergun D.I. // Current Research in Structural Biology. 2020. V.2. P. 164–170.

СД-V-07

Перспективы использования жёсткого рентгеновского излучения для анализа почечных камней in vivo

Низовский А.И.[1], Шмаков А.Н.[2], Легкодымов А.А.[2], Бехтерева К.А.[3], Феофилов. И.В.[3]
1 – Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Сибирский кольцевой источник фотонов, Кольцово, Россия
3 – ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный медицинский университет» Минздрава России, Новосибирск, Россия
alexniz@inbox.ru

Дистанционная литотрипсия (ДЛТ), основанная на использовании электрогидравлического эффекта, является одним из основных методов лечения мочекаменной болезни. Спецификой метода является механическое разрушение камней непосредственно в почке или мочеточнике под воздействием высокоэнергетической акустической волны сфокусированной в области локализации камня. При этом вся энергия акустической волны диссипируется не только на уролите, но также на его осколках и ткани почки. В современных литотрипторах автоматически устанавливается режим воздействия на уролит исходя из данных по плотности камня по шкале Хаунсфилда, которая является функцией плотности камня и никак не учитывает его минеральный состав. Плотность определяется по рентгенограмме почки пациента. По сути, эта шкала задает массовый коэффициент поглощения данного камня и определяется лишь его элементным составом. Долгое время в литературе активно обсуждались отдаленные последствия использования литотрипсии, приводящие к серьезным осложнениям, таким как развитие диабета и гипертонии. Таким образом, оптимизация энергии воздействия акустической волны является весьма важной задачей.

Сформулированная более 20 лет назад как чисто диагностическая, направленная на уточнение диагноза МКБ по данным рентгенофазового анализа конкрементов после сеанса литотрипсии данная работа легла в основу фундаментальной разработки по оценке возможности создания метода анализа минерального состава нефролитов in vivo.

Исследованы методом рентгеновской дифракции почечные камни в составе объектов-фантомов, имитирующих тело пациента, на синхротронном излучении при 33.7 кэВ, 69.5 кэВ и 112 кэВ. Использовалось излучение накопителей ВЭПП-3 и ВЭПП-4М Сибирского Центра Синхротронного и Терагерцового Излучения (СЦСТИ) при Институте ядерной физики СО РАН, г. Новосибирск (ИЯФ СО РАН). Показано, что использование монохроматического синхротронного $E \geq 69.5$ кэВ позволяет надежно идентифицировать минеральный состав уролитов.

Переход в более жесткий энергетический диапазон позволяет существенно уменьшить радиационную нагрузку на пациентов во время диагностики. Фактор веса пациентов также становится менее критичен. Указанный диапазон 60-110 кэВ принципиально важен, так как этот обычный рабочий диапазон диагностических медицинских рентгеновских аппаратов.

СД-V-08

Изучение олигомерных форм рекомбинантных лед-связывающих белков

Олейник Г.А.[1], Канарская М.А.[1,2], Рижиков Ю.Л.[3,4], Баранова С.В.[1]
1 – Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск, Россия
2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
3 – Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
4 – Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия
swb@niboch.nsc.ru

В холодных экосистемах для выживания у организмов нарабатываются лед-связывающие белки (IBP). IBP очень разнообразны, существенно отличаются по размеру, структуре и способу связывать лёд. Уникальные свойства этих белков применяются в медицине, в качестве криопротекторов при транспортировке клеток, тканей и органов, сельском хозяйстве при хранении зерна и пищевой промышленности для сохранения вкуса и качества замороженных продуктов. Поэтому в последнее время наблюдается повышенный интерес к исследованию лед-связывающих белков [1–3], но структурно-динамические механизмы действия IBP при распознавании и связывании поверхности льда до сих пор остаются неизвестными.

Рядом исследователей показано [4–6], что эффективность связывания льда возрастает за счет увеличения площади взаимодействия белка со льдом, что предполагает наличие олигомерных форм. Кроме того, обнаружено, что сыворотка из антарктического угря (*Lycodichthys Dearborni*), содержит внутримолекулярный димер, который демонстрирует значительное усиление термического гистерезиса по сравнению с мономером [5].

Объектами исследования были: белки A0ZT93, найденный у рыб *Brachyopsis segaliensis*, и P80961, обнаруженный у *Myoxocephalus octodecemspinosus*. Изучение олигомерного состояния проводили на рекомбинантных белках.

Наличие олигомерных форм в растворе проводили с помощью времяпролетного масс-спектрометра Autoflex Speed (ИХБФМ, Новосибирск, Россия), методом матрично-активированной лазерной десорбции/ионизации (MALDI). Интерпретация масс-спектров дает представление о наличии зарегистрированных пиков, принадлежащих лед-связывающим белкам и их олигомерным формам.

На масс-спектре белка P80961 присутствуют олигомерные формы, соответствующие димеру, тримеру и тетрамеру. Помимо этого, обнаружены многозарядные ионы (M^{2+} и M^{3+}), которые позволяют с большей точностью подтвердить массу олигомерных форм. При анализе масс-спектров образцов, полученных после замораживания, было обнаружено присутствие олигомерных форм более высокого порядка: пентамер, гексамер, гептамер и их двухзарядные ионы. Эти формы детектировались с низкой интенсивностью. Анализ масс-спектров белка A0ZT93 также показал наличие олигомеров разных порядков.

Полученные данные подтверждены разделением белковых комплексов в полиакриламидном геле в нативных условиях. Олигомерные формы визуализируются преимущественно в диапазоне масс, соответствующих димеру, тримеру и тетрамеру. В

верхней части изображений гелей видна размытость белковых полос, что указывает на гетерогенность образцов и присутствие крупных олигомерных форм.

Структурные особенности изучены методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Измерения были выполнены с использованием прибора Rigaku MicroMax-007HF (МФТИ, Долгопрудный, Россия) и на установке BL19U2 в Шанхайском центре синхротронного излучения (SSRF, Шанхай, Китай) Национального центра науки о белках (NFPS). Интенсивность пучка на образце составляла ~ 3-4×10^{12} photons/sec, а диапазон модуля вектора рассеяния q составлял 0.006-0.456 $Å^{-1}$. Полученные данные показали, что белок A0ZT93 в растворе присутствует в виде ассоциатов с размерами 70 нм и больше. Из данных МУРР была проведена оценка радиуса гирации и размера белка: Rg ~ 179 Å; Dmax ~ 697 Å. Расчетный радиус гирации Rg для белка P80961 близок к 60 Å. Максимальный диаметр частиц Dmax ~ 208 Å.

Размеры белков определены с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ). Анализ АСМ-изображений показал, что в растворе белка P80961 присутствуют вытянутые частицы с различными характерными размерами: 5 нм – 20 нм, 17 нм – 27 нм, 28 нм – 40 нм и 44 нм – 60 нм. Наблюдается небольшая высота частиц, которая может свидетельствовать о мягкости белковых структур, диспергированых на поверхности. Анализ АСМ-изображений белка A0ZT93 показал наличие комплексов круглой и вытянутой формы. Характерный размер частиц ~ 78 нм, также встречаются частицы больше 100 нм в длину. Анализ полученных данных АСМ указывает на то, что в растворе образуется несколько различных по размеру олигомерных форм. Сравнение данных МУРР с результатами атомно-силовой микроскопии для белков выявило заметное соответствие структурных размеров.

Проведённое исследование позволило охарактеризовать лед-связывающие белки P80961 и A0ZT93, и подчеркнуло сложность выбранного класса объектов исследования. Нетривиальность лед-связывающих белков делает их интересным объектом для дальнейшего изучения. Полученные знания, позволят в будущем создать искусственные аналоги, которые будут применяться в разных сферах деятельности для предотвращения разрушений после замораживания-оттаивания, что позволит избежать повреждений.

Благодарности: Исследование было поддержано грантом РНФ 23-24-00256 и проектом базового бюджетного финансирования ИХБФМ СО РАН № FWGN-2025-0020.

Литература:

[1] Davies P.L. // Biochemistry and cell biology. 2022. 100. P. 282–91.
[2] Jia Z., Davies P.L. // Trends Biochem Sci. 2002. 27. P. 101–6.
[3] Correia L.F.L., Alves B.R.C., Batista R.I.T.P., Mermillod P., Souza-Fabjan J.M.G. // Theriogenology. 2021. 176. P. 94–103.
[4] Baardsnes J., Kuiper M.J., Davies P.L. // J Biol Chem. 2003. 278. P. 38942–7.
[5] Nishimiya Y., Ohgiya S., Tsuda S. // J Biol Chem. 2003. 278. P. 32307–12.
[6] Sönnichsen F.D., DeLuca C.I., Davies P.L., Sykes B.D. // Structure. 1996. 4. P. 1325–37.

СД-V-09

Применение малоуглового рассеяния рентгеновских лучей для анализа структуры аптамеров и конформационных изменений

Смородина Е.Д.[1,2], Морячков Р.В.[1], Павлова Г.В.[3], Кичкайло А.С.[1,4]
1 – ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН», Красноярск, Россия
2 – Сибирский Федеральный университет, Красноярск, Россия
3 – Научно-исследовательский институт нейрохирургии имени академика Н.Н. Бурденко, Москва, Россия
4 – Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф.Войно-Ясенецкого, Красноярск, Россия
zmorobina@gmail.com

Интерес к аптамерам как специфическим рецепторным молекулам обусловлен наличием различных функциональных групп, которые могут связываться с ионами тяжелых и переходных металлов [1]. Это свойство способствовало развитию области аналитической химии, в которой изучаются взаимодействия и возможность использования аптамеров в биосенсорах с целью мониторинга окружающей среды. Для разработки аналитических тест-систем используются как линейные аптамеры, так и аптамеры, образующие определенные структуры (квадруплекс, шпилька, петля). Аптамеры к раковым клеткам используются для диагностики и терапии рака, выявляют присутствие раковых клеток в тканях и крови человека, проявляют каталитическую активность путем ингибирования функции белков-мишеней, а также агентами для доставки лекарств. Чтобы использовать эти функции, важно знать, как аптамеры связываются со своими мишенями, меняют ли они конформацию при этом связывании, как доставляется “груз”, влияет на структуру аптамера и, следовательно, на специфичность. В этой работе метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) был применен для изучения пространственной структуры аптамеров ДНК. Этот метод позволяет изучать пространственную структуру молекул в масштабе от 0,5 нм до сотен нм в нативной среде, отслеживать конформационные изменения при различных условиях (температура, pH, ионный состав раствора, в процессе связывания с молекулярными мишенями аптамеров и т.д.) непосредственно в растворе. SAXS активно используется для исследования структуры белков и в последнее время стал интересен для изучения структур олигонуклеотидов ДНК/РНК и аптамерно-белковых комплексов [2]. Образцы аптамеров HD1, biHD1 в присутствие ионов Na, K и Ba представляют собой последовательности нуклеотидов: для HD1– GGTTGGTGTGGTTGG, 15 nt, 4726,1 г/моль, и для biHD1– GGTTGGTGTGGTTGGTGGTTGGTGTGGTTGG, 31nt, 9818 г/моль. Структурный анализ проводился методом SAXS. Данные SAXS были обработаны в программном комплексе ATSAS, были получены такие параметры структуры, как максимальный размер молекулы D_{max}, радиус инерции R_g, объем молекулы, пересчитанный в молекулярную массу, также построена шариковая модель аптамеров для всех образцов.

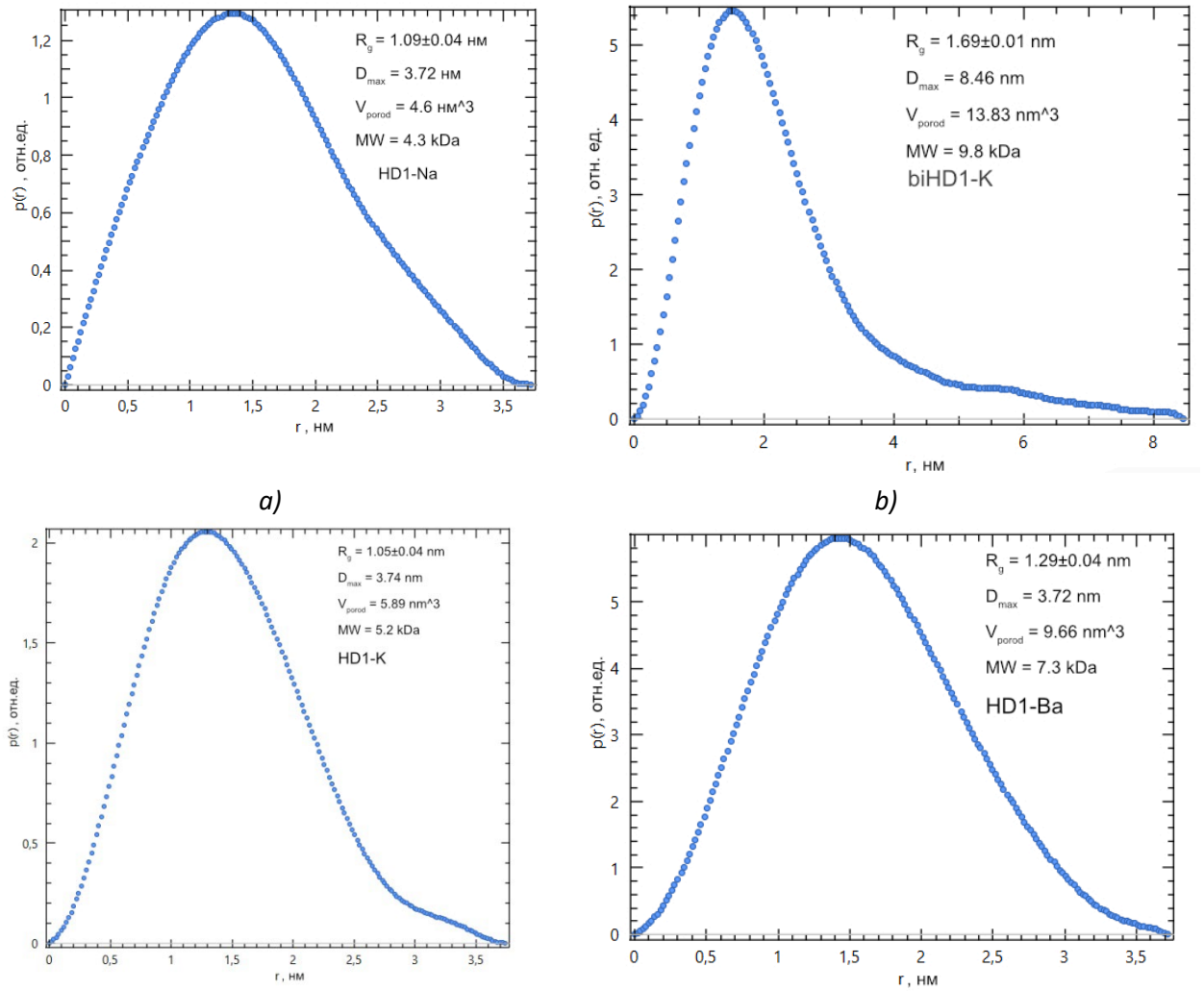


Рис. 1. Функция распределения по расстояниям для молекулы аптамера, построенная на основе данных МУРР. a) Образец аптамера HD1 в присутствие иона Na. b) Образец аптамера biHD1 в присутствие иона K. c) Образец аптамера HD1 в присутствие иона K. d) Образец аптамера HD1 в присутствие иона Ba

Литература:

[1] Zhou, W., R. Saran,J. Liu // Chemical Reviews. 2017. T.117. C. 8272-8325.

[2] Tomilin F. N. et al. Four steps for revealing and adjusting the 3D structure of aptamers in solution by small-angle X-ray scattering and computer simulation //Analytical and bioanalytical chemistry. – 2019. T. 411. №. 25. C. 6723-6732.

СД-V-10

Сравнение структур белков химозинов архара *Ovis ammon* и белого медведя *Ursus maritimus*

Укладов Е.О.[1,2], Беленькая С.В.[2,3], Щербаков Д.Н.[3], Шевцов М.Б.[4], Борщевский В.И.[4], Архипов С.Г.[1,2]

1 – ЦКП «СКИФ», Новосибирск, Россия

2 – Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

3 – ФБУН ГНЦ ВБ Вектор Роспотребнадзора, Кольцово, Россия

4 – Центр исследований молекулярных механизмов старения и возрастных заболеваний, МФТИ, Москва, Россия

e.o.ukladov@srf-skif.ru

Химозин - фермент класса аспартатных протеаз, играющий ключевую роль в процессе усвоения молока на ранних этапах постнатального развития. Химозин вырабатываются желудочными железами млекопитающих, а также имеют особое значение в производстве сычужных ферментов, используемых для свёртывания молока при изготовлении сыров [1]. Изучение пространственных структур химозинов различных организмов и их сравнение открывает перспективы для рационального дизайна новых мутантных форм химозинов с необходимыми для пищевой промышленности характеристиками.

Актуальность исследования химозинов обусловлена необходимостью оптимизации их свойств для промышленного применения. В данной работе представлены результаты расшифровки и анализа кристаллических структур белков химозинов архара *Ovis ammon* и белого медведя *Ursus maritimus*.

Для наработки белков были использованы продуценты на основе молочных дрожжей K.lactis, полученные во ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора. Очистку белков проводили при помощи комплекса хроматографических методов.

Далее проводилась кристаллизация полученных белков методом диффузии паров используя технику сидячей капли [2]. Полученные кристаллы были исследованы методом рентгеноструктурного анализа с использованием источника синхротронного излучения. Интегрирование первичных данных и решение структуры производилось с использованием модулей программного пакета CCP4.

Структура химозина белого медведя была решена по первичным данным собранными методом вращающего кристалла с итоговым разрешением 2.6 Å, R_{factor} 0.19097, R_{free} 0.23288. Структура химозина архара была решена с использованием данных, собранных методом small-batch crystallography (разрешение 2.5 Å, R_{factor} 0.25005, R_{free} 0.33533).

Расшифрованные структуры имеют высокое сходство (значение RMSD полученное при выравнивании полученных структур равно 0.561 Å (см. рис. 1)). В результате уточнения структур не удалось установить положение аминокислотных остатков образующих неструктурированные петли, участвующие в захвате субстрата. Это свидетельствует о высокой подвижности данных участков белка. Высокое структурное сходство и довольно высокая гомология последовательностей (78,68%) говорят о консервативности данных белков и важности их функции в организме.

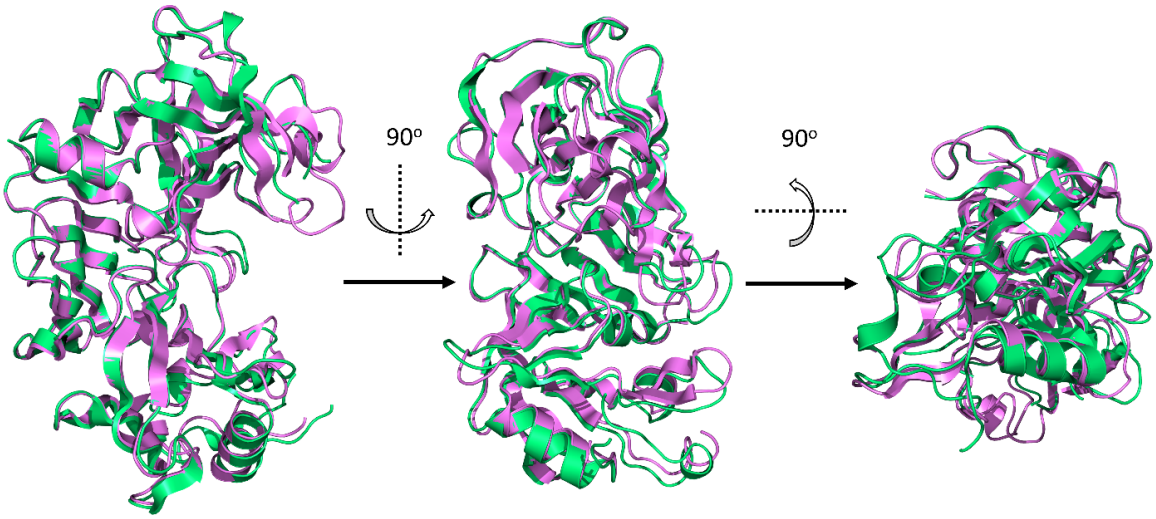


Рис.1. Выравнивание структур химозинов архара (зелёный) и белого медведя (фиолетовый).

Благодарности: Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0040)

Литература:

[1] Uniacke-Lowe, T. Chymosin, Pepsins, and Other Aspartyl Proteinases: Structures, Functions, Catalytic Mechanism and Milk-Clotting Properties / T. Uniacke-Lowe, P. F. Fox. – Text : electronic // Cheese. – 2025. – P. 73-131. – URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/B9780443159565000270 (date accessed: 05.09.2025).

[2] A systematic comparison of sitting and hanging-drop crystallization using traditional and cross-diffusion microbatch crystallization plates / H. Hou, M. Shi, S. Y. Hu [et al.]. – Text : electronic // Journal of Crystal Growth. – 2019. – Vol. 521. – P. 1-8. – URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S002202481930274X (date accessed: 05.09.2025).

Список участников

Do Thi Khanh Linh
Institute for Nuclear Science and Technology
Hanoi, Vietnam
vkhkthn@vinatom.gov.vn

Le Tuan Anh
Institute for Nuclear Science and Technology
Hanoi, Vietnam
le.tuan.anh@vinatom.gov.vn

Le Xuan Chung
Institute for Nuclear Science and Technology
Hanoi, Vietnam
Chunglx_inst@mic.gov.vn

Luu Anh Tuyen
Center for Nuclear Technologies (VINATOM)
Hanoi, Vietnam
tuyenluuanh@gmail.com

Nguyen Tuan Khai
Vietnam Atomic Energy Institute (VINATOM)
Hanoi, Vietnam
nguyentuankhai@mst.gov.vn

Pham Duc Khue
Institute for Nuclear Science and Technology
Hanoi, Vietnam
khuepd_inst@mic.gov.vn

Айдаков Егор Евгеньевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
e.aydakov@catalysis.ru

Акимов Альберт Софронович
Институт химии нефти СО РАН
Томск, Россия
akimov149@yandex.ru

Акимова Ксения Андреевна
Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
akimovaka@my.msu.ru

Александров Александр Александрович
Институт общей физики
им. А.М. Прохорова РАН
Москва, Россия
alexandrov1996@yandex.ru

Александрова Наталья Сергеевна
Новосибирский государственный
технический университет
Новосибирск, Россия
aleksandrovanatalie99@gmail.com

Алтынбаев Евгений Владимирович
Санкт-Петербургский государственный
университет
Санкт-Петербург, Россия
e.altynbaev@spbu.ru

Амброс Елена Валерьевна
Центральный сибирский
ботанический сад СО РАН
Новосибирск,
Россия
ambros_ev@mail.ru

Антипов Михаил Владимирович
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Саров, Россия
MVAntipov@vniief.ru

Антонова Елизавета Ивановна
Новосибирский государственный
университет
Новосибирск, Россия
lisa04.04@mail.ru

Антропова Кристина Александровна
Новосибирский государственный
технический университет
Новосибирск, Россия
antropova.2017@stud.nstu.ru

Апарина Ульяна Александровна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
u.a.aparina@srf-skif.ru

Аринин Владимир Александрович
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Саров, Россия
VAArinin@vniief.ru

Артемьева Марина Андреевна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
m.artemeva1@g.nsu.ru

Архипов Сергей Григорьевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия,
arksergey@gmail.com

Асадчиков Виктор Евгеньевич
Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
asad@crys.ras.ru

Асанов Игорь Петрович
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
asan@niic.nsc.ru

Асылкаев Артур Марселевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.m.asylkaev@srf-skif.ru

Аульченко Владимир Михайлович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
aulchenko@inp.nsk.su

Бабитова Екатерина Сергеевна
Санкт-Петербургский государственный университет
Санкт-Петербург, Россия
st064214@student.spbu.ru

Багрова Наталья Викторовна
Новосибирский государственный университет архитектуры, дизайна и искусств имени А.Д. Крячкова
Новосибирск, Россия
priem_rekt@nsuada.ru

Балаш Илья Ильич
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
ilyabalash@yandex.ru

Баранников Александр Александрович
Балтийский федеральный университет им. И. Канта
Калининград, Россия
abarannikov95@gmail.com

Баранова Светлана Владимировна
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирск, Россия
swb@1bio.ru

Батаев Анатолий Андреевич
Новосибирский государственный технический университет
Новосибирск, Россия
bataev@adm.nstu.ru

Бедарева Алина Евгеньевна
ГК "Научное оборудование"
Новосибирск, Россия
bedareva@spegroup.ru

Белоусов Андрей Петрович
Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН
Новосибирск, Россия
belousovap@tdisie.nsc.ru

Беляев Данил Викторович
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Екатеринбург, Россия
danil.belyaev08@gmail.com

Белякова Алиса Юрьевна
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
a.belyakova@g.nsu.ru

Бердюгин Семен Николаевич
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
berdyugin@niic.nsc.ru

Бережная Ольга Михайловна
НИТУ МИСиС
Москва, Россия
berezhol@mail.ru

Бирюкова Марина Анатольевна
ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»
Снежинск, Россия

Блюменштейн Валерий Юрьевич
Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева
Кемерово, Россия
blumenstein@rambler.ru

Бондарева Анастасия Фёдорова
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
a.bondareva04@mail.ru

Борщевский Валентин Иванович
Московский физико-технический институт
Долгопрудный, Россия
borshchevskiy@gmail.com

Бродников Александр Федорович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
braf@mail.ru

Бузмаков Алексей Владимирович
Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
buzmakov@gmail.com

Булавченко Ольга Александровна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
obulavchenko@catalysis.ru

Булгаков Никита Алексеевич
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирск, Россия
bulgakov@1bio.ru

Булушева Любовь Геннадьевна
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
bul@niic.nsc.ru

Бурдилов Александр Александрович
Новосибирский государственный технический университет
Новосибирск, Россия
burdillov12@gmail.com

Бухтияров Андрей Валерьевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
avb@catalysis.ru

Бухтияров Валерий Иванович
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
vib@catalysis.ru

Бычков Игорь Вячеславович
Институт динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова СО РАН
Иркутск, Россия
bychkov@icc.ru

Валеев Ришат Галеевич
Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН
Ижевск, Россия
rishatvaleev@udman.ru

Вебер Сергей Леонидович
Международный томографический центр СО РАН
Новосибирск, Россия
sergey.veber@tomo.nsc.ru

Винокуров Захар Сергеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
vinzux@mail.ru

Вишнёва Стелла Александровна
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
s.vishneva@g.nsu.ru

Вишневская Ирина Андреевна
ООО "Группа Ай-Эм-Си"
Москва, Россия
via@imc-systems.ru

Власов Максим Игоревич
Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН
Екатеринбург, Россия
m_vlasov@ihte.ru

Волков Юрий Олегович
Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
volkov.y@crys.ras.ru

Воробьев Сергей Александрович
Институт химии и химической технологии СО РАН
Красноярск, Россия
yekspatz@ya.ru

Вяткин Юрий Викторович
ООО "Новые Программные Системы"
Новосибирск, Россия
yuri@novel-soft.com

Гаас Вячеслав Александрович
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
gaas.va@yandex.ru

Гаврилова Ксения Сергеевна
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
gks-2510@mail.ru

Гаврилова Таисия Германовна
Институт горного дела имени Н.А. Чинакала СО РАН
Новосибирск, Россия
gavrilova.t.g@mail.ru

Гайдамака Анна Аркадьевна
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
a.gaidamaka@g.nsu.ru

Гармашев Александр Юрьевич
ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»
Снежинск, Россия

Генцелев Александр Николаевич
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
ang1209@mail.ru

Геонджиан Андрей Юрьевич
Сколковский институт науки и технологий
Москва, Россия
a.geondzhian@skoltech.ru

Герасимов Евгений Юрьевич
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
gerasimov@catalysis.ru

Герцель Илья Сергеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
i.gertsel@g.nsu.ru

Гилеп Андрей Александрович
ГУ "Институт биоорганической химии НАН Беларуси"
Минск, Беларусь

Гладышева Анастасия Витальевна
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора
Наукоград Кольцово, Россия
nastya95.ru@list.ru

Гоголев Алексей Сергеевич
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Томск, Россия
gogolev@tpu.ru

Голубков Виктор Александрович
Институт химии и химической технологии СО РАН
Красноярск, Россия
golubkov.va@icct.krasn.ru

Гольденберг Борис Григорьевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
b.g.goldenberg@srf-skif.ru

Голяшов Владимир Андреевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
vladimirgolyashov@gmail.com

Горбатенков Дмитрий Михайлович
ООО "Группа Ай-Эм-Си"
Москва, Россия
dmg@imc-systems.ru

Горкуша Александр Сергеевич
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
deepforesttt922@gmail.com

Горностаев Дмитрий Андреевич
ООО "Адватекс"
Москва, Россия
dg@advatex.ru

Гулимова Виктория Игоревна
НИИ морфологии человека ФГБНУ "РНЦХ им. акад. Б.В. Петровского"
Москва, Россия
gulimova@yandex.ru

Дарьин Адрей Викторович
Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН
Новосибирск, Россия
av-darin@yandex.ru

Дарьин Федор Андреевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово,Россия
fdaryin@gmail.com

Денисов Владимир Викторович
Институт сильноточной электроники СО РАН
Томск, Россия
volodyadenisov@yandex.ru

Дихтяр Юрий Юрьевич
Сколковский институт науки и технологий
Москва, Россия
yurydikhtyar@gmail.com

Довженко Глеб Денисович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
dovjenko.g@gmail.com

Дороватовский Павел Владимирович
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
paulgemini@mail.ru

Дубок Александр Сергеевич
Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН
Новосибирск, Россия
a.dubok1@g.nsu.ru

Дударева Алина Алексеевна
Новосибирский государственный технический университет
Новосибирск, Россия
dudareva-alina@mail.ru

Дымова Майя Александровна
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирск, Россия
maya.a.rot@gmail.com

Дырхеева Надежда Сергеевна
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирск, Россия
elpida80@mail.ru

Евсеев Игорь Дмитриевич
Институт химической кинетики и горения СО РАН
Новосибирск, Россия
i.evseev@alumni.nsu.ru

Евсеев Федор Александрович
Научно-аналитический центр рационального недропользования им. В.И. Шпильмана
Ханты-Мансийск, Россия
fedor_evseev@rambler.ru

Евшин Иван Сергеевич
Научно-технологический университет «Сириус»
Федеральная территория "Сириус", Россия
yevshin@gmail.com

Ерунов Сергей Владимирович
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Саров, Россия
postmaster@ifv.vniief.ru

Есикова Екатерина Дмитриевна
Новосибирский государственный технический университет
Новосибирск, Россия
kate.esikova@mail.ru

Ефременко Варвара Филипповна
Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
varvario@vk.com

Жданкин Григорий Иванович
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
g.zhdankin@g.nsu.ru

Жирнова Анастасия Сергеевна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
zhirnova@catalysis.ru

Журавлева Дарья Алексеевна
ГК "Научное оборудование"
Новосибирск, Россия
d.zhuravleva@spegroup.ru

Заблуда Владимир Николаевич
Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН
Красноярск, Россия
zvn@iph.krasn.ru

Завьялов Алексей Павлович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
zav_alexey@list.ru

Завьялов Петр Сергеевич
Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН
Новосибирск, Россия
zavyalov@tdisie.nsc.ru

Зверев Дмитрий Алексеевич
Балтийский федеральный университет им. И. Канта
Калининград, Россия
daswazed@ya.ru

Зверева Валентина Викторовна
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
zvereva@niic.nsc.ru

Зенкевич Андрей Владимирович
Московский физико-технический институт
Долгопрудный, Россия
zenkevich.av@mipt.ru

Золотарев Константин Владимирович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
zolotarev@inp.nsk.su

Золотарев Михаил Константинович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
m.k.zolotarev@srf-skif.ru

Зорин Артем Викторович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
zorinartem@internet.ru

Зосько Николай Андреевич
Институт химии и химической технологии СО РАН
Красноярск, Россия
rtkm.1@mail.ru

Зубавичус Ян Витаутасович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
ya.v.zubavichus@srf-skif.ru

Иванов Юрий Федорович
Институт сильноточной электроники СО РАН
Томск, Россия
yufi55@mail.ru

Иванова Анастасия Артёмовна
Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург, Россия
a.a.ivanova@mail.ioffe.ru

Иванова Юлия Андреевна
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
y.ivanova3@g.nsu.ru

Ивлев Александр Александрович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.ivlev1@g.nsu.ru

Кадцын Евгений Дмитриевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
e.kadtsyn@g.nsu.ru

Казанцев Сергей Романович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
s.kazantsev@alumni.nsu.ru

Казанцев Федор Павлович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
fedor52k@gmail.com

Каичев Василий Васильевич
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
vvk@catalysis.ru

Калганов Дмитрий Александрович
Университет ИТМО
Санкт-Петербург, Россия
kalganov@itmo.ru

Калинина Полина Петровна
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
p.kalinina@g.nsu.ru

Камелина Кристина Дмитриевна
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Томск, Россия
kdk11@tpu.ru

Кан Татьяна Викторовна
Казахский национальный университет имени аль-Фараби (КазНУ)
Алматы, Казахстан
tatyanaqan@gmail.com

Карпинский Дмитрий Владимирович
ГО "НПЦ по материаловедению НАН Беларуси", Минск, Беларусь
karpinsky@physics.by

Карпов Денис Вячеславович
Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН
Новосибирск, Россия
karpden@inbox.ru

Каханова Виктория Дмитриевна
ФИЦ Красноярский научный центр СО РАН
Красноярск, Россия
viktoriia.fedotovskaia@gmail.com

Кашкаров Алексей Олегович
Институт гидродинамики имени М.А. Лаврентьева СО РАН
Новосибирск, Россия
kashkarov@hydro.nsc.ru

Киряева Татьяна Анатольевна
Институт горного дела имени Н.А. Чинакала СО РАН
Новосибирск, Россия
coalmetan@mail.ru

Кичкайло Анна Сергеевна
ФИЦ Красноярский научный центр СО РАН
Красноярск
Россия
annazamay@yandex.ru

Кленов Александр Иванович
ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»
Снежинск, Россия

Клименко Ольга Анатольевна
Сибирское отделение РАН
Новосибирск, Россия
olga_klimenko12@mail.ru

Клиначева Наталия Леонидовна
Южно-Уральский государственный университет
Челябинск, Россия
klinachevanl@susu.ru

Князев Юрий Владимирович
Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН
Красноярск, Россия
yuk@iph.krasn.ru

Ковалев Александр Денисович
НИТУ МИСиС
Москва, Россия
cowalyow.san@yandex.ru

Коваль Николай Николаевич
Институт сильноточной электроники СО РАН
Томск, Россия
nn.koval@hcei.ru

Ковтунова Лариса Михайловна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
kovtunova@catalysis.ru

Колесова Ольга Владимировна
Новосибирский государственный
технический университет
Новосибирск, Россия
kolesova@list.ru

Колупанова Мария Алексеевна
Центр вычислительной физики МФТИ
Долгопрудный, Россия
kolupanova.ma@phystech.edu

Колыбалов Дмитрий Сергеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
d.kolybalov@g.nsu.ru

Комаров Владислав Юрьевич
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
komarov@niic.nsc.ru

Кондаков Алексей Анатольевич
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
kondakov@inp.nsk.su

Кондранова Анастасия Михайловна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
a.kondranova@gmail.com

Коновалова Анна Юрьевна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
eliminator400@ya.ru

Конторович Елена Владимировна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
3995556@mail.ru

Конюкова Алла Вячеславовна
Институт химии твёрдого тела УрО РАН
Екатеринбург, Россия
alla.konyukova.5656@mail.ru

Копылов Александр Дмитриевич
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
sanka.kopp@gmail.com

Корнейчик Олег Евгеньевич
ООО "Техноинфо"
Москва, Россия
o.korneychik@technoinfo.ru

Коротаев Евгений Владимирович
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
korotaev@niic.nsc.ru

Корсунский Александр Михайлович
Сколковский институт науки и технологий
Москва, Россия
korsunskygroup@gmail.com

Коршунов Сергей Александрович
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Саров, Россия
SAkorshunov@vniief.ru

Корытцева Анастасия Константиновна
Национальный исследовательский
Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского
Нижний Новгород, Россия
koak@chem.unn.ru

Костина Елена Алексеевна
Институт экономики и организации
промышленного производства СО РАН
Новосибирск, Россия
ovs.elena@gmail.com

Коченева Анна Геннадьевна
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
anna.kocheneva@gmail.com

Кравцов Евгений Алексеевич
Институт физики металлов
им. М.Н. Михеева УрО РАН
Екатеринбург, Россия
kravtsov@imp.uran.ru

Краснобородько Сергей Юрьевич
ООО Научно-технологический центр
"ЭМТИОН"
Москва, Россия
krasnoborodko@mteon.ru

Краснова Ольга Семёновна
Новосибирский государственный
технический университет
Новосибирск, Россия
olgakrasnova1312@gmail.com

Кремнева Анна Михайловна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.m.kremneva@srf-skif.ru

Кречетов Андрей Александрович
Кузбасский государственный технический
университет имени Т.Ф. Горбачева
Кемерово, Россия
andykrech.gm@gmail.com

Кривенко Александр Сергеевич
ООО "ЭПОС-Инжиниринг"
Новосибирск, Россия
askrivenko@epos-nsk.ru

Кривенцов Владимир Владимирович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
kriven@mail.ru

Крупович Елена Сергеевна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
elena.krup42@gmail.com

Кудияров Виктор Николаевич
Национальный исследовательский
Томский политехнический университет
Томск, Россия
victor31479@mail.ru

Кудрявцев Артем Леонидович
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
kudryavtcevarteml@gmail.com

Кузенкова Анастасия Сергеевна
Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
kyznastya@mail.ru

Кузин Максим Витальевич
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
kuzin@inp.nsk.su

Кузнецов Сергей Викторович
Институт общей физики
им. А.М. Прохорова РАН
Москва, Россия
kouznetzovsv@gmail.com

Кузнецова Татьяна Владимировна
Институт физики металлов
им. М.Н. Михеева УрО РАН
Екатеринбург, Россия
kuznetsova@imp.uran.ru

Кузьмин Вячеслав Сергеевич
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Саров, Россия
VSKuzmin@vniief.ru

Купер Константин Эдуардович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
k.e.kuper@inp.nsk.su

Куренкова Анна Юрьевна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.yu.kurenkova@gmail.com

Кутькин Олег Максимович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
kutkino@list.ru

Лаврик Ольга Ивановна
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирск, Россия
lavrik@1bio.ru

Лаврухина Светлана Александровна
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
x-rayspectroscopy@mail.ru

Лазаренко Владимир Александрович
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
vladimir.a.lazarenko@gmail.com

Лазуренко Дарья Викторовна
Новосибирский государственный технический университет
Новосибирск, Россия
pavlyukova_87@mail.ru

Лакиенко Григорий Павлович
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
grigorylakienko@gmail.com

Ларичев Юрий Васильевич
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
ylarichev@gmail.com

Лебедев Михаил Петрович
ФИЦ Якутский научный центр СО РАН
Якутск, Россия
m.p.lebedev@prez.ysn.ru

Лев Леонид Леонидович
Московский физико-технический институт
Долгопрудный, Россия
lll_ru@mail.ru

Левахова Алёна Юрьевна
Центр «Высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов» им. В.Л. Гинзбурга ФИАН
Москва, Россия
levakhovaayu@lebedev.ru

Левичев Евгений Борисович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
skif@srf-skif.ru

Легкодымов Александр Алексеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.a.legkodymov@srf-skif.ru

Лихацкий Максим Николаевич
Институт химии и химической технологии СО РАН
Красноярск, Россия
lixmax@icct.ru

Лихачев Алексей Валерьевич
Институт автоматики и электрометрии СО РАН
Новосибирск, Россия
ipm1@iae.nsk.su

Лихачева Анна Юрьевна
Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН
Новосибирск, Россия
alih@igm.nsc.ru

Логунова Светлана Сергеевна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
logunova@catalysis.ru

Макаров Сергей Николаевич
Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН
Новосибирск, Россия
msn@tdisie.nsc.ru

Макарова Марина Викторовна
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Екатеринбург, Россия
makarova@imp.uran.ru

Максимова Ксения Юрьевна
Балтийский федеральный университет им. И. Канта
Калининград, Россия
xmaksimova@gmail.com

Маликов Александр Геннадьевич
Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН
Новосибирск, Россия
smalik707@yandex.ru

Малыгина Александра Борисовна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.b.malygina@srf-skif.ru

Малышев Илья Вячеславович
Институт физики микроструктур РАН
Нижний Новгород, Россия
ilya-malyshev@ipmras.ru

Мартьянов Александр Олегович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.martyanov1@g.nsu.ru

Марченков Никита Владимирович
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
Marchenkov_nv@nrcki.ru

Матяш Алексей Романович
Международный томографический центр СО РАН
Новосибирск, Россия
matyash@tomo.nsc.ru

Мацаев Булат Аптиевич
Сколковский институт науки и технологий
Москва, Россия
bulat.matsaev@skoltech.ru

Меренцов Александр Ильич
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Екатеринбург, Россия
merentsov@tralex01.ru

Михейкина Анна Андреевна
Институт химии и химической технологии СО РАН
Красноярск, Россия
miheikina.anna@yandex.ru

Михненко Максим Дмитриевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
m.mikhnenko@catalysis.ru

Мищенко Денис Давыдович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
q14999@yandex.ru

Молодцева Ульяна Владимировна
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
veennoomm@mail.ru

Мостовщиков Андрей Владимирович
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Томск, Россия
pasembellum@mail.ru

Мохова София Сергеевна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
s.s.mokhova@srf-skif.ru

Мурзина Анастасия Васильевна
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
murzina.anastasiia@yandex.ru

Мясников Андрей Юрьевич
Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
Барнаул, Россия
myasnickov.andre@yandex.ru

Насенник Игорь Евгеньевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
i.e.nasennik@srf-skif.ru

Нерсисян Давид Арменович
Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева
Кемерово, Россия
dave62171@gmail.com

Низовский Александр Иванович
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
alexniz@inbox.ru

Никитин Станислав Евгеньевич
Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН
Красноярск, Россия
Nikitin.stas.92@gmail.com

Никифоров Данила Алексеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
d.a.nikiforov@srf-skif.ru

Николенко Антон Дмитриевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.d.nikolenko@inp.nsk.su

Никулин Алексей Донатович
Институт белка РАН
Пущино, Россия
nikulin@vega.protres.ru

Носкова Светлана Александровна
ООО "МИЛЛАБ"
Москва, Россия
sn@millab.ru

Овсянник Вадим Владимирович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
ovsyannik2013@mail.ru

Овсянников Александр Сергеевич
Казанский федеральный университет
Казань, Россия
osaalex2007@rambler.ru

Овчинникова Елена Николаевна
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
ovchinnikovaen@my.msu.ru

Окотруб Александр Владимирович
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
spectrum@niic.nsc.ru

Олейник Галина Александровна
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирск, Россия
oleinik@1bio.ru

Орешко Алексей Павлович
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
oreshkoap@my.msu.ru

Осинкина Ирина Александровна
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора
Наукоград Кольцово, Россия
osinkina_ia@vector.nsc.ru

Осипов Иван Аркадьевич
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
io8951508@gmail.com

Павлова Анна Сергеевна
Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
Новосибирск, Россия
anyajohnya@yandex.com

Пак Софья Валентиновна
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
paksofya@yandex.ru

Панафидин Максим Андреевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
mpanafidin@catalysis.ru

Панина Мария Викторовна
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
Москва, Россия
maaria381@gmail.com

Патолятов Алексей Дмитриевич
Московский физико-технический институт
Долгопрудный, Россия
patoliatov.ad@phystech.edu

Пахарукова Вера Павловна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
verapakharukova@yandex.ru

Петрикова Елизавета Алексеевна
Институт сильноточной электроники СО РАН
Томск, Россия
petrikova@opee.hcei.tsc.ru

Петров Иван Юрьевич
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
i.petrov2@g.nsu.ru

Петроченко София Александровна
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
sofik0904@mail.ru

Петухов Максим Владимирович
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
Москва, Россия
pmxmvl@yandex.ru

Петякина Анастасия Сергеевна
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН
Новосибирск, Россия
mikaeva@isp.nsc.ru

Пиминов Павел Алексеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
piminov@inp.nsk.su

Платунов Михаил Сергеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
msplatunov@gmail.com

Плешков Дмитрий Николаевич
ООО "Техноинфо"
Москва, Россия
d.pleshkov@technoinfo.ru

Плиева Дана Спартаковна
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
danaplieva099@gmail.com

Плис Анна Ивановна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово
Россия

Полшков Дмитрий Алексеевич
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Саров, Россия
DAPolshkov@vniief.ru

Полютов Сергей Петрович
Сибирский федеральный университет
Красноярск, Россия
polyutov@mail.ru

Пономарева Екатерина Алексеевна
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Екатеринбург, Россия
kat9107@yandex.ru

Попик Василий Михайлович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
popik.vm@gmail.com

Попов Александр Николаевич
Московский физико-технический институт
Долгопрудный, Россия
popov.an@mipt.ru

Потеряев Владимир Сергеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
v.s.poteryaev@srf-skif.ru

Пригородова Анна Николаевна
ФИЦ угля и углехимии СО РАН
Кемерово, Россия
h991@ya.ru

Прокопенко Андрей Александрович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
A.A.Prokopenko@inp.nsk.su

Просвирин Игорь Петрович
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
prosvirin@catalysis.ru

Прууэл Эдуард Рейнович
Институт гидродинамики имени М.А. Лаврентьева СО РАН
Новосибирск, Россия
pru@hydro.nsc.ru

Пряничников Степан Викторович
Институт металлургии УрО РАН
Екатеринбург, Россия
stepian@yandex.ru

Пустоваров Владимир Алексеевич
Уральский федеральный университет
Екатеринбург, Россия
vpustovarov@bk.ru

Пылова Екатерина Константиновна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
e.pylova@g.nsu.ru

Радченко Дарья Андреевна
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора
Наукоград Кольцово, Россия
darya.a.00@yandex.ru

Радченко Никита Сергеевич
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора
Наукоград Кольцово, Россия
radchenko_ns@vector.nsc.ru

Родионова Ольга Владимировна
ГК "Научное оборудование"
Новосибирск, Россия
rodionova@spegroup.ru

Романчук Анна Юрьевна
Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
romanchuk.anna@gmail.com

Рубцов Иван Андреевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
i.a.rubtsov@srf-skif.ru

Саввиных Мария Александровна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
m.a.savvinykh@srf-skif.ru

Савин Сергей Сергеевич
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
bellaccqua@gmail.com

Самсонов Александр Николаевич
Институт гидродинамики
\имени М.А. Лаврентьева СО РАН
Новосибирск, Россия
sams_alexandr@mail.ru

Сараев Андрей Александрович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово
Россия
asaraev@catalysis.ru

Светогоров Роман Дмитриевич
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
rdsvetov@gmail.com

Седельников Никита Сергеевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
n.s.sedelnikov@srf-skif.ru

Седов Андрей Алексеевич
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
andrey.sedov1999@gmail.com

Селиванов Дмитрий Федорович
ООО Научно-технологический центр
"ЭМТИОН"
Москва, Россия

Селиванова Александра Васильевна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
avselivanova@catalysis.ru

Семушкина Галина Игоревна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
spectroscopy@mail.ru

Синева Лада Олеговна
Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова
Москва, Россия
ladasineva@mail.ru

Скоков Дмитрий Владимирович
Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН
Новосибирск, Россия
skokov@tdisie.nsc.ru

Слободенюк Яна Игоревна
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
y.slobodenyuk@g.nsu.ru

Смирнов Дмитрий Игоревич
ООО "Адватекс"
Москва, Россия
ds@advatex.ru

Смирнов Евгений Борисович
ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»
Снежинск, Россия

Смирнова Надежда Сергеевна
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН
Москва, Россия
ns-smirnova@ioc.ac.ru

Смородина Екатерина Дмитриевна
Сибирский федеральный университет
Красноярск, Россия
zmorobina@gmail.com

Снигирев Анатолий Александрович
Балтийский федеральный университет им. И. Канта
Калининград, Россия
anatoly.snigirev@gmail.com

Собачкин Алексей Викторович
Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
Барнаул, Россия
anicpt@rambler.ru

Солдатов Михаил Александрович
Международный институт интеллектуальных материалов Южного Федерального университета
Ростов-на-Дону, Россия
mikhailsoldatov@sfedu.ru

Соловова Надежда Юрьевна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
solovovanadezda822@gmail.com

Соловьева Марина Владимировна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
mvl.solovyeva@gmail.com

Сонина Алина Александровна
Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН
Новосибирск, Россия
belalina04@gmail.com

Спирин Иван Алексеевич
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Саров, Россия
IASpirin@vniief.ru

Стародубцева Алена Анатольевна
Казахский национальный университет имени аль-Фараби (КазНУ)
Алматы, Казахстан
alena.a.rubanova@gmail.com

Статник Евгений Сергеевич
Сколковский институт науки и технологий
Москва, Россия
eugene.statnik@skoltech.ru

Студенников Алексей Александрович
Институт гидродинамики имени М.А. Лаврентьева СО РАН
Новосибирск, Россия
aleksei.studennikov@mail.ru

Суворова Дарья Александровна
Новосибирский государственный технический университет
Новосибирск, Россия
daria.suvorovaqw0410@gmail.com

Суворова Марина Сергеевна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
suvorova@catalysis.ru

Сурикова Екатерина Евгеньевна
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
sur-nrcki@yandex.ru

Сутурин Сергей Михайлович
Физико-технический институт
имени А.Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург, Россия
suturin@mail.ioffe.ru

Сухарина Галина Борисовна
Южный федеральный университет
Ростов-на-Дону, Россия
gbsukharina@sfedu.ru

Сухих Леонид Григорьевич
Национальный исследовательский
Томский политехнический университет
Томск, Россия
sukhikh@tpu.ru

Сыртанов Максим Сергеевич
Институт сильноточной электроники СО РАН
Томск, Россия
maxim-syrtanov@mail.ru

Сычкова Дарина Сергеевна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
d.sychkova@g.nsu.ru

Тагиров Борис Робертович
Институт геологии рудных месторождений,
петрографии, минералогии и геохимии РАН
Москва, Россия
boris1t@yandex.ru

Таргонский Антон Вадимович
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
tantva@yandex.ru

Ташкеев Никита Артемович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
n.a.tashkeev@srf-skif.ru

Ташланов Михаил Юрьевич
Сколковский институт науки и технологий
Москва, Россия
mikhail.tashlanov@skoltech.ru

Тен Константин Алексеевич
Институт гидродинамики
имени М.А. Лаврентьева СО РАН
Новосибирск, Россия
ten@hydro.nsc.ru

Терехов Алексей Евгеньевич
МАОУ "Лицей № 22 "Надежда Сибири"
Новосибирск, Россия
agenus80@mail.ru

Терещенко Олег Евгеньевич
Институт физики полупроводников
им. А.В. Ржанова СО РАН
Новосибирск, Россия
teresh@isp.nsc.ru

Тиньков Виталий Александрович
ООО «Токио Боэки Евразия»
Москва, Россия
vitaliy.tinkov@tokyo-boeki-ea.com

Титова София Сергеевна
Воронежский государственный университет
Воронеж, Россия
titova@phys.vsu.ru

Токарев Денис Сергеевич
Национальный исследовательский
Томский политехнический университет
Томск, Россия
dst13@tpu.ru

Томилин Феликс Николаевич
Институт физики им. Л.В. Киренского
ФИЦ КНЦ СО РАН
Красноярск, Россия
felixnt@gmail.com

Тригуб Александр Леонидович
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
trigub_al@nrcki.ru

Трубина Светлана Владимировна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
svt@niic.nsc.ru

Трунова Валентина Александровна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
valna-t@mail.ru

Турищев Сергей Юрьевич
Воронежский государственный университет
Воронеж, Россия
tsu@phys.vsu.ru

Укладов Егор Олегович
Новосибирский государственный
университет
Новосибирск, Россия
e.ukladov@g.nsu.ru

Улыбин Дмитрий Анатольевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
d.a.ulybin@mail.ru

Урубков Илья Владимирович
ООО «Токио Боэки Евразия»
Москва, Россия
ilya.urubkov@tokyo-boeki-ea.com

Усачев Константин Сергеевич
ФИЦ "Казанский научный центр РАН"
Казань, Россия
k.usachev@mail.ru

Фадеева Анастасия Константиновна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия

Фатеев Кирилл Александрович
Воронежский государственный университет
Воронеж, Россия
fateev@phys.vsu.ru

Федоренко Анастасия Дмитриевна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск
Россия
fedorenko@niic.nsc.ru

Федоров Алексей Юрьевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.yu.fedorov@srf-skif.ru

Федосеева Юлия Владимировна
Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева СО РАН
Новосибирск, Россия
fedoseeva@niic.nsc.ru

Феофанов Владимир Сергеевич
ООО "МИЛЛАБ"
Москва, Россия
vf@millab.ru

Филимонов Алексей Владимирович
Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
Санкт-Петербург, Россия
filalex@inbox.ru

Фирсова Алина Александровна
ГК "Научное оборудование"
Новосибирск, Россия
firsova@spegroup.ru

Халеменчук Вячеслав Павлович
Институт гидродинамики
имени М.А. Лаврентьева СО РАН
Новосибирск, Россия
slava.khalemenchuk@mail.ru

Хаметова Элина Фанилевна
Удмуртский федеральный
исследовательский центр УрО РАН
Ижевск, Россия
elinaphanilevna851@gmail.com

Харченко Надежда Алексеевна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
n.kharchenko@g.nsu.ru

Химич Маргарита Андреевна
Институт физики прочности и
материаловедения СО РАН
Томск, Россия
khimich@ispms.ru

Ходаков Михаил Дмитриевич
ГК "Научное оборудование"
Новосибирск, Россия
khodakov@spegroup.ru

Хомяков Юрий Вадимович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
yu.v.khomyakov@yandex.ru

Храпова Екатерина Константиновна
Физико-технический институт
имени А.Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург, Россия
e.k.khrapova@mail.ioffe.ru

Хрущев Сергей Владимирович
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
s.v.khruschev@inp.nsk.su

Цветков Юрий Вячеславович
ООО "Адватекс"
Москва, Россия
advatex@bk.ru

Цицилина Дарья Михайловна
Институт горного дела
имени Н.А. Чинакала СО РАН
Новосибирск, Россия
tsitsilinadm@mail.ru

Цыбуля Сергей Васильевич
Новосибирский государственный
университет
Новосибирск, Россия
sergey.tsybulya@yandex.ru

Черепанова Светлана Витальевна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
svch@catalysis.ru

Черкасов Алексей Михайлович
Московский физико-технический институт
Долгопрудный, Россия
cherkasov.am@phystech.edu

Черкасов Антон Владимирович
ООО "Техноинфо"
Москва, Россия
a.cherkasov@technoinfo.ru

Черпакова Анастасия Вадимовна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
ache@catalysis.ru

Четырин Игорь Анатольевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
chia@catalysis.ru

Шабанова Марина Сергеевна
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
sbvmari@catalysis.ru

Шакиров Дмитрий Станиславович
Новосибирский государственный
университет
Новосибирск, Россия
d.shakirov@g.nsu.ru

Шакиров Станислав Рудольфович
Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН
Новосибирск, Россия
shakirov@sscc.ru

Шамьюнов Камиль Маратович
НИЦ «Курчатовский институт»
Москва, Россия
shamiunov.km@phystech.edu

Шарафутдинов Марат Рашидович
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
marat@solid.nsc.ru

Шарая Светлана Сергеевна
Новосибирский государственный
университет
Новосибирск, Россия
s.sharaya@g.nsu.ru

Шевченко Владимир Григорьевич
Институт химии твёрдого тела УрО РАН
Екатеринбург, Россия
shevchenko@ihim.uran.ru

Шестаковская Елена Сергеевна
Южно-Уральский государственный
университет
Челябинск, Россия
shestakovskaiaes@susu.ru

Шефер Кристина Ивановна
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
k.i.shefer@srf-skif.ru

Шехтман Лев Исаевич
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
L.I.Shekhtman@inp.nsk.su

Шиц Елена Юрьевна
ФИЦ Якутский научный центр СО РАН
Якутск, Россия
l.u.shitz@mail.ru

Шкаруба Виталий Аркадьевич
Институт ядерной физики СО РАН
Новосибирск, Россия
shkaruba@mail.ru

Шкварин Алексей Сергеевич
Институт физики металлов
им. М.Н. Михеева УрО РАН
Екатеринбург, Россия
shkvarin@imp.uran.ru

Школдина Анна Алексеевна
ГК "Научное оборудование"
Новосибирск, Россия
shkoldina@spegroup.ru

Шмаков Александр Николаевич
ЦКП «СКИФ»
Наукоград Кольцово, Россия
a.n.shmakov@inp.nsk.su

Шурыгин Антон Владимирович
Дальневосточный федеральный университет
Владивосток, Россия
shurygin.av@dvfu.ru

Щетинин Игорь Викторович
НИТУ МИСиС
Москва, Россия
ingvar@misis.ru

Эман Ксения Владимировна
ООО «Диаэм»
Новосибирск, Россия
keman@dia-m.ru; krazum@dia-m.ru

Юргин Александр Борисович
Новосибирский государственный
технический университет
Новосибирск, Россия
yurgin2012@yandex.ru

Юрковец Дмитрий Иванович
ООО «Токио Боэки Евразия»
Москва, Россия
dmitry.yurkovets@tokyo-boeki-ea.com

Якушев Илья Аркадьевич
Институт общей и неорганической химии
им. Н.С. Курнакова РАН
Москва, Россия
cs68@mail.ru

Яншин Алексей Олегович
ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора
Наукоград Кольцово, Россия
a.yanshin@g.nsu.ru

Яровая Ольга Ивановна
Новосибирский институт органической
химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН
Новосибирск, Россия
ooo@nioch.nsc.ru

Яценко Дмитрий Анатольевич
Институт катализа СО РАН
Новосибирск, Россия
yatsenko@catalysis.ru

Содержание

Пленарные лекции 7

ПЛ-1
Ковальчук М.В., Благов А.Е., Марченков Н.В.
Синхротронные и нейтронные исследования в России: текущий статус и перспективы 9

ПЛ-2
Бухтияров В.И
ЦКП «СКИФ»: Текущий статус проекта 11

ПЛ-3
Романчук А.Ю.
Опыт использования синхротронного излучения для решения фундаментальных и прикладных задач радиохимии 12

ПЛ-4
Пиминов П.А.
Источник синхротронного излучения ЦКП СКИФ и его пользовательские характеристики 13

ПЛ-5
Шкаруба В.А.
Устройства генерации излучения ЦКП «СКИФ» 14

ПЛ-6
Светогоров Р.Д.
Синхротрон «КИСИ-Курчатов» - текущий статус, перспективы развития, пользовательская политика 15

ПЛ-7
Борщевский В.И., Попов А.Н.
Рентгеновская дифрактометрия макромолекулярных монокристаллов 17

ПЛ-8
Шехтман Л.И.
Детекторы рентгеновского излучения: статус и перспективы для станций ЦКП «СКИФ» 18

ПЛ-9
Солдатов М.А., Проценко Б., Кулаев К., Гуда С.А., Гуда А.А., Солдатов А.В.
Искусственный интеллект и машинное обучение на синхротронах: от обработки данных на лету к планированию эксперимента 19

Ключевые лекции 21

КЛ-01
Благов А.Е., Марченков Н.В., Пресняков М.Ю., Рожков А.Ю., Самарин А.В., Таргонский А.В., Царев Г.А., Якунин С.Н., Ковальчук М.В.
Источник синхротронного излучения поколения 4+ с рентгеновским лазером на свободных электронах «СИЛА»: текущий статус и перспективы 23

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ 25

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ ПО СТАНЦИЯМ 27

УДс-01
Шарафутдинов М.Р., Дарьин А.В., Дарьин Ф.А., Ращенко С.В., Ракшун Я.В., Хомяков Ю.В., Глушков Е.И., Гоголев А.С., Горбачев М.В., Чернов В.А.
Экспериментальные возможности станции 1-1 «Микрофокус» ЦКП СКИФ 27

УДс-02
Винокуров З.С., Зубавичус Я.В., Шмаков А.Н., Мищенко Д.Д., Селютин А.Г., Сыртанов М.С., Гоголев А.С., Денисов В.В., Тересов А.Д., Панченко Ю.Н., Ковальский С.С., Бескончин К.В., Киселев В.Н., Евдокимов А.А., Андреев М.В.
Экспериментальные возможности станции 1-2 «Структурная диагностика» ЦКП СКИФ 28

УДс-03
Рубцов И.А., Бухтияров А.В., Зубавичус Я.В., Казанцев С.Р., Купер К.Э., Прууэл Э.Р., Тен К.А., Толочко Б.П., Шехтман Л.И.
Станция 1-3 «Быстропротекающие процессы». Научная программа 30

УДс-04
Сараев А.А., Зубавичус Я.В., Винокуров З.С., Мищенко Д.Д., Селютин А.Г., Булавченко О.А., Цыбуля С.В., Архипов С.Г., Федоров А.Ю., Ковальский С.С., Бескончин К.В., Денисов В.В., Бухтияров В.И.
Станция 1-4 «XAFS-спектроскопия и магнитный дихроизм».
Станция 1-7 «Базовые методы синхротронной диагностики для образовательной, исследовательской и инновационной деятельности студентов» 31

УДс-05
Купер К.Э., Легкодымов А.А., Завьялов П.С., Макаров С.Н., Скоков Д.В.
Станция* первой очереди ЦКП СКИФ *«Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне» 33

УДс-06
Бухтияров А.В., Панафидин М.А., Николенко А.Д., Четырин И.А., Голяшов В.А., Терещенко О.Е., Квон Р.И., Просвирин И.П., Бухтияров В.И.
Экспериментальная станция 1-6 «Электронная структура» ЦКП «СКИФ» 34

УДс-07
Джаркинов Р.Б., Пискунов С.А., Шишаев Г.Ю., Мерзликин Б.С., Гоголев А.С.
Применение методов глубокого обучения для измерения неразрешенной пористости по данным томографической съемки 35

УДс-08
Денисов В.В., Винокуров З.С., Зубавичус Я.В., Шмаков А.Н., Мищенко Д.Д., Селютин А.Г., Ковальский С.С., Бескончин К.В., Тересов А.Д., Сыртанов М.С., Киселев В.Н., Евдокимов А.А., Панченко Ю.Н., Андреев М.В., Коновалов И.Н.
Проектирование и создание оборудования для экспериментальной станции 1-2 «структурная диагностика» ЦКП «СКИФ» 37

УДс-09
Прууэл Э.Р., Студенников А.А., Тен К.А., Толочко Б.П., Рубцов И.А., Шехтман Л.И.
Станция 1-3 «Быстропротекающие процессы». Особенности создания 38

УДс-10
Завьялов П.С., Макаров С.Н., Скоков Д.В., Купер К.Э.
Разработка оборудования фронтендов и экспериментальных станций первой очереди ЦКП «СКИФ» – опыт КТИ НП СО РАН 39

УДс-11
Зубавичус Я.В., Бухтияров А.В.
Экспериментальные станции второй очереди ЦКП «СКИФ» 41

УДс-12
Гольденберг Б.Г.
Вспомогательные исследования и пробоподготовка в Лабораторном корпусе ЦКП «СКИФ» 42

УДс-13
Потеряев В.С.
Центр обработки данных. Текущее состояние 43

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ 44

УД-01
Романчук А.Ю., Тригуб А.Л., Новичков Д.А., Кузенкова А.С., Петров В.Г., Калмыков С.Н.
Проект станции для исследования радиоактивных образцов (станция второй очереди ЦКП «СКИФ») 44

УД-02
Цыбуля С.В., Захаров Б.А., Болдырева Е.В.
Подготовка кадров для синхротронных исследований: опыт Новосибирского государственного университета 45

УД-03
Статник Е.С., Салимон А.И., Корсунский А.М.
Опыт разработки и применения новых экспериментальных схем *operando* на станциях синхротрона Diamond 47

УД-04
Гельмуханов Ф.Х., Кимберг В.В., Краснов П.О., Полютов С.П.
Прямое рентгеновское зондирование ультрабыстрой динамики переноса заряда 48

УД-05
Овчинникова Е.Н., Орешко А.П., Дмитриенко В.Е.
Резонансная дифракция синхротронного излучения в кристаллах. Запрещенные отражения 50

УД-06
Снигирев А.А.
***In-line* когерентная рентгеновская оптика: три десятилетия развития** 52

УД-07
Лазаренко В.А., Дороватовский П.В., Светогоров Р.Д.
Текущие экспериментальные возможности экспериментальной станции «Белок/РСА» Курчатовского источника синхротронного излучения и обзор ярких результатов, полученные в 2024/2025 годах 53

УД-08
Дырхеева Н.С., Лаврик О.И.
Рентгеноструктурный анализ в создании лекарственных препаратов на основе ингибиторов ферментов репарации ДНК 54

УД-09
Никулин А.Д., Панкратова П.Ю., Михайлина А.О., Леконцева Н.В.
Исследование РНК-белковых комплексов с использованием синхротронного излучения ..55

УД-10
Усачев К.С., Юсупов М.М.
Кристаллография рибосом как инструмент для фармакологии 56

УД-11
Дороватовский П.В., Лазаренко В.А., Светогоров Р.Д.
Экспериментальная станция «Серийная макромолекулярная кристаллография» на источнике синхротронного излучения 4-го поколения «СИЛА» 58

УД-12
Бузмаков А.В., Кривоносов Ю.С., Дьячкова И.Г., Золотов Д.А., Гулимова В.И., Юнеман О.А., Савельев С.В., Букреева И.Н., Асадчиков В.Е.
Рентгеновская фазоконтрастная микротомография для исследования биологических объектов 59

УД-13
Малышев И.В., Реунов Д.Г., Чхало Н.И., Голышев С.А., Казаков Е.П., Кутькин О.М., Ракшун Я.В., Хомяков Ю.В., Чернов В.А., Седов А.А.
Сканирующий и проекционный микроскопы станции 2-5 «Наноскопия в мягком диапазоне» для биологических исследований в «окне прозрачности воды» 61

УД-14
Турищев С.Ю., Беликов Е.А., Паринова Е.В., Чувенкова О.А., Какулия Ю.С., Чумаков Р.Г., Лебедев А.М., Пичкур Е.Б., Требунских С.Ю., Преображенская Е.В, Сиваков В., Антипов С.С.
Биогибридный материал на основе молекул Dps клеток E.coli: опыт синхротронных и лабораторных исследований 63

УД-15
Томилин Ф.Н., Щугорева И.А., Рогова А.В., Заблуда В.Н., Кичкайло А.С.
Получение структуры белков и аптамеров с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния и теоретических методов 64

УД-16
Кичкайло А.С., Морячков Р.В., Заблуда В.Н., Федотовская В.Д.
Синхротронные методы в биомедицинских исследованиях 65

УД-17
Штыкова Э.В., Петухов М.В., Батищев О.В.
Комплексный подход с применением МУРР в структурной биологии: некоторые результаты и перспективы 66

УД-18
Тагиров Б.Р., Тригуб А.Л., Привалова К.А., Чареева П.В.
Возможности спектроскопии поглощения рентгеновского излучения для исследования состояния благородных и высокотехнологичных металлов в рудных минералах и гидротермальных флюидах 68

УД-19
Зенкевич А.В.
Синхротронные спектроскопические исследования *in operando* прототипов перспективных устройств наноэлектроники и спинтроники 70

УД-20
Булушева Л.Г., Загузина А.А., Федоренко А.Д., Семушкина Г.И., Николенко А.Д., Окотруб А.В.
Исследование электронного состояния MoS_2 в натрий-ионном аккумуляторе методами рентгеновской спектроскопии in situ и operando 72

УД-21
Карпинский Д.В., Латушко С.И., Желудкевич Д.В., Силибин М.В., Гилеп А.А.
Исследование твердых растворов $Bi_{1-y}Sm_yFe_{1-x}Ti_xO_3$ методами дифракции нейтронов и синхротронного излучения..... 73

УД-22
Шевченко В.Г., Еселевич Д.А., Конюкова А.В., Винокуров З.С., Толочко Б.П.
Перспективность использования СИ в создании новых функциональных материалов 75

УД-23
Алтынбаев Е.В., Гоголинский К.В., Моисеев Н.Н.
Разработка станции для метрологического обеспечения контроля качества изделий и аттестации технологических процессов аддитивных производств..... 76

УД-24
Евсеев Ф.А., Иванов И.А.
Технологии синхротронного излучения для развития нефтяной отрасли ХМАО-Югры 78

УД-25
Прокопенко Н.А., Петрикова Е.А., Иванов Ю.Ф., Коваль Н.Н., Шмаков А.Н., Толкачёв О.С.
Плазменно-ассистированное напыление высокоэнтропийного биосовместимого покрытия и исследование его структуры с использованием синхротронного излучения..... 80

УД-26
Собачкин А.В., Логинова М.В., Ситников А.А., Яковлев В.И., Филимонов В.Ю., Мясников А.Ю., Шарафутдинов М.Р.
Применение метода дифракции синхротронного излучения для исследования устойчивости состава аморфно-кристаллических порошковых материалов в условиях контролируемого отжига..... 82

УД-27
Блюменштейн В.Ю., Кречетов А.А., Махалов М.С., Нерсисян Д.А., Учайкин С.Е., Останин О.А.
Оценка накопленной деформации и поврежденности металлов методами дифракции синхротронного излучения..... 84

УД-28
Зверев Д.А., Кузнецов С.М., Юнкин В.А., Снигирев А.А.
Формирователи рентгеновского пучка на основе элементов преломляющей оптики для когерентных источников излучения.....86

УД-29
Асанов И.П., Федоренко А.Д., Бердюгин С.Н.
XANES исследование магнитных свойств галогенидных комплексом Re(IV) 88

УД-30
Князев Ю.В., Балаев Д.А., Дубровский А.А., Семёнов С.В., Кириллов В.Л., Мартьянов О.Н.
Размерный эффект магнитного перехода в ультрамалых наночастицах ε-Fe_2O_3 по данным метода ядерного рассеяния вперёд 90

УД-31
Сонина А.А., Чешкина Д.С., Коскин И.П., Казанцев М.С.
Темплатная кристаллизация органических полупроводников 91

УД-32
Якушев И.А., Панина М.В., Сосунов Е.А.
Синтез каталитически активных моно- и полиядерных карбоксилатных соединений платины и палладия 93

УД-33
Никифоров Д.А.
Источник сверхкоротких электронных пучков для ультрабыстрой дифрактоскопии.....94

УД-34
Асадчиков В.Е., Рощин Б.С., Волков Ю.О., Тихонов А.М., Нуждин А.Д.
Применение рентгеновской рефлектометрии и дифракции в скользящей геометрии с использованием синхротронных источников для исследования твердых и жидких подложек и нанесенных на них слоистых структур 95

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ МОЛОДЕЖНАЯ СЕКЦИЯ 96

УДм-01
Асылкаев А.М., Тен К.А., Рубцов И.А., Прууэл Э.Р., Кашкаров А.О., Туманик А.С., Халеменчук В.П., Студенников А.А.
Скоростная рентгенография ударно-волнового сжатия пластикового гироида 96

УДм-02
Камелина К.Д., Панин А.В., Сыртанов М.С., Кашкаров Е.Б.
In situ рентгеновские исследования фазовых переходов в титановом сплаве Ti-6Al-4V, полученном аддитивной проволочной технологией, при высокотемпературном наводороживании 98

УДм-03
Насенник И.Е., Батаев И.А.
Анализ трибологических характеристик объемных металлических стекол системы ZrHfAlCo(Ni,Cu) с использованием дифракции синхротронного рентгеновского излучения.....100

УДм-04
Халеменчук В.П., Тен К.А., Прууэл Э.Р., Кашкаров А.О., Асылкаев А.М., Туманик А.С., Рубцов И.А., Карсанова Т.В.
Динамика потоков струй при ударном воздействии на металлические пластины с прямоугольными пазами 102

УДм-05
Хаметова Э.Ф., Бакиева О.Р., Кривенцов В.В.
Анализ EXAFS-спектров NdBaMn2O6 и системы Au-Pt, содержащих область перекрытия сигналов 104

УДМ-06
Харченко Н.А., Пахарукова В.П., Стонкус О.А., Горлова А.М., Рогожников В.Н., Потемкин Д.И.
Влияние условий конечной термообработки катализаторов $Ni/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ на их структурную организацию и функционирование в реакции метанирования CO_2 105

УДм-07
Черкасов А.М., Абросимов К.Н., Герке К.М.
Реконструкция структуры пористых сред методами стохастического моделирования на основе данных малоуглового рассеяния 107

УДм-08
Голубков В.А., Зайцева Ю.Н., Сычёв В.В., Еремина А.О., Таран О.П.
Нанесённые суб- и наночастицы рутения на мезопористых кислотных углеродных и оксидных носителях для гидрирования углеводов 109

УДм-09
Седельников Н.С., Четырин И.А., Бухтияров А.В.
Изучение эффекта адсорбционно-индуцированной сегрегации под воздействием метана как инструмента контроля состава поверхности $Pd-Ag/\alpha-Al_2O_3$ катализаторов методом РФЭС 111

УДм-10
Титова С.С., Цурикова У.А., Осминкина Л.А., Чумаков Р.Г., Лебедев А.М., Канныкин С.В., Беликов Е.А., Синельников А.А., Какулия Ю.С., Сальков С.И., Паринова Е.В., Чувенкова О.А., Турищев С.Ю.
Синхротронные исследования биосовместимых наночастиц пористого кремния 113

УДм-11
Мартьянов А.О., Панафидин М.А., Бухтияров А.В., Просвирин И.П., Зубавичус Я.В., Бухтияров В.И.
Модельные биметаллические Rh-In/ВОПГ катализаторы: приготовление, РФЭС и СТМ исследование 115

УДм-12
Токарев Д.С., Мостовщиков А.В., Сыртанов М.С., Шарафутдинов М.Р.
Применение синхротронного излучения для исследования динамики фазообразования структур алюмината кальция 117

УДм-13
Улыбин Д.А.
Программная библиотека *DIFS* для расчета и оптимизации стратегий рентгенодифракционных монокристальных экспериментов 119

УДм-14
Фатеев К.А., Чувенкова О.А., Рябцев С.В., Чумаков Р.Г., Шрамков Е.А., Пелагина А.К., Занин И.Е., Турищев С.Ю.
Формирование, морфология и состав, атомное и электронное строение нитевидных кристаллов диоксида олова 121

УДм-15
Мурзина А.В., Виноградов А.В., Попов Н.Л.
Оптимизация и применение алгоритмов восстановления фазы в методе CDI 123

УДм-16
Радченко Д.А., Гладышева А.В.
Исследование пространственных структур нетранслируемых регионов РНК генома Kindia tick virus методом малоуглового рентгеновского рассеяния и разработка технологической платформы для их кристаллизации 124

УДм-17
Яншин А.О., Гладышева А.В.
Исследование структуры нуклеопротеинов недавно обнаруженных вирусов (Beiji nairovirus и Songling virus) с помощью интеграции вычислительных и синхротронных методов 126

УДм-18
Кузенкова А.С., Плахова Т.В., Куликова Е.С., Светогоров Р.Д., Тригуб А.Л., Крамар Б.В., Шаульская М.Д., Цымбаренко Д.М., Романчук А.Ю., Калмыков С.Н.
Применение синхротронного излучения для установления структуры и свойств новых актинидсодержащих фаз 128

УДм-19
Осинкина И.А., Гладышева А.В.
Исследование пространственной структуры первого белка структурной части полипротеина вируса Хасеки 130

УДм-20
Шарая С.С., Захаров Б.А., Богданов Н.Е., Болдырева Е.В.
Сравнительный анализ структур аминокислот: влияние ароматических взаимодействий на симметрию и деформацию 132

УДм-21
Винокуров З.С., Лашина Е.А., Каичев В.В., Сараев А.А.
Изучение явления автоколебаний в окислительных реакциях на палладиевом и никелевом катализаторах методами in situ рентгеновской дифракции 133

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ СПОНСОРЫ 135

УДсп
Горностаев Д.А., Смирнов Д.И., Цветков Ю.В.
Современные системы неразрушающего анализа и формирования покрытий: от лабораторного оборудования к синхротронной станции 135

Стендовые доклады 137

I. Оборудование для станций СИ ЦКП СКИФ 139

СД-I-01
Баранников А.А., Зверев Д.А., Лятун И.И., Панормов И.Б., Снигирев А.А.
Тестирование рентгеновской оптики для синхротронных исследований на базе лабораторного рентгенооптического комплекса 139

СД-I-02
Завьялов П.С., Макаров С.Н., Белоусов А.П., Золотарев К.В., Николенко А.Д., Овсянник В.В.
Моделирование эксплуатационных режимов рентгенооптических элементов ондуляторных фронтендов синхротронных источников поколения 4+ 141

СД-I-03
Борщевский В.И.
Экспериментальная станция второй очереди 2-2 143

СД-I-04
Генцелев А.Н., Гольденберг Б.Г., Баев С.Г., Кузнецов С.А.
Проект LIGA-станции для источника синхротронного излучения «СКИФ» 144

СД-I-05
Ракшун Я.В., Дарьин Ф.А., Шацкий А.Ф., Дарьин А.В., Ращенко С.В., Хомяков Ю.В., Чернов В.А.
Концептуальный проект станции «РФА-Геология» ЦКП «СКИФ» 146

СД-I-06
Довженко Г.Д., Батаев И.А., Эмурлаев К.И., Насенник И.Е., Александрова Н.С., Юргин А.Б., Зверев Д.А., Снигирев А.А., Климова-Корсмик О.Г.
Эскизный проект станции 2-1 «Инженерное материаловедение» 148

СД-I-07
Жданкин Г.И., Захаров Б.А.
Разработка оптической схемы станции «Монокристалл» ЦКП «СКИФ» для *in situ* и *operando* рентгеноструктурного анализа с высоким пространственным и временным разрешением 150

СД-I-08
Завьялов А.П., Пустоваров В.А., Каменских И.А., Ивановских К.В., Мешков О.И., Косьянов Д.Ю.
Эскизный проект станции 2-ой очереди «Люминесцентная спектроскопия с временным разрешением» 152

СД-I-09
Завьялов П.С., Скоков Д.В., Кравченко М.С., Карпов Д.В., Кутькин О.М., Завьялова М.А., Денежкин Е.Н.
Быстродействующий пьезоэлектрический экспозиционный затвор для пучков синхротронного излучения высокой яркости поколения 4+ 154

СД-I-10
Карпов Д.В., Завьялов П.С., Власов Е.В., Ермоленко А.В., Макаров С.Н., Белоусов А.П., Кузнецов С.В., Седов В.С., Купер К.Э.
Разработка мониторов положения пучка на основе люминесценции синтетических алмазов для источников СИ поколения 4+ 156

СД-I-11
Кузнецова Т.В., Терещенко О.Е., Голяшов В.А., Бухтияров А.В., Кузнецов М.В., Зубавичус Я.В.
Концептуальный дизайн и основные экспериментальные методы станции «УРАЛ» в мягком рентгеновском диапазоне 158

СД-I-12
Макаров С.Н., Скоков Д.В., Довженко Г.Д., Купер К.Э.
Разработка двухкристального монохроматора с меридиональным изгибом для станции 1-5 ЦКП «СКИФ» 159

СД-I-13
Токарев Д.С., Мостовщиков А.В., Гольденберг Б.Г.
Применение люминесцентных материалов для визуализации пучка синхротронного излучения 161

СД-I-14
Дмитриев А.М., Золотарев К.В., Забродский В.В., Кузин С.В., Николенко А.Д., Федоренко А.Д., Платунов М.С., Шмаков А.Г., Папко С.С.
Эскизный проект станции второй очереди «Спектроскопия и метрология мягкого рентгеновского диапазона» 163

СД-I-15
Орешко А.П.
Моделирование распространения ограниченных импульсов синхротронного излучения в дифракционных оптических элементах 164

СД-I-16
Петякина А.С., Голяшов В.А., Бакин В.В., Степанов С.А., Кустов Д.А., Русецкий В.С., Рожков С.А., Шайблер Г.Э., Демин А.Ю., Терещенко О.Е.
Детектор спина электронов с пространственным разрешением на основе ферромагнитных мембран 165

СД-I-17
Самсонов А.Н., Ведерников Е.Ф.
Разработка устройства фиксации быстропротекающих процессов с легкосъемным матричным чувствительным элементом 167

СД-I-18
Седов А.А., Мезенцев Н.А., Ракшун Я.В., Сафронов А.Н., Хомяков Ю.В., Чернов В.А., Шкаруба В.А.
Разработка сверхпроводящих спиральных ондуляторов 169

СД-I-19
Скоков Д.В., Макаров С.Н., Довженко Г.Д., Купер К.Э.
Разработка двухкристального монохроматора с сагиттальной фокусировкой для станции 1-5 ЦКП «СКИФ» 171

СД-I-20
Студенников А.А., Пальчиков Е.И., Прууэл Э.Р., Станкевич С.В.
Разработка быстрого затвора пучка для станции 1-3 «Быстропротекающие процессы» ЦКП «СКИФ» 173

СД-I-21
Сурикова Е.Е., Чумаков Р.Г.
Моделирование и оптимизация монохроматора с плоскими дифракционными решетками для мягкого рентгеновского диапазона 175

СД-I-22
Бескончин К.В., Денисов В.В., Винокуров З.С., Сыртанов М.С., Ковальский С.С., Дульцев К.И., Назаров А.С., Шмаков А.Н.
Дискретные рентгеновские трансфокаторы станции 1-2 «Структурная диагностика» 176

СД-I-23
Бескончин К.В., Денисов В.В., Винокуров З.С., Сыртанов М.С., Ковальский С.С., Тересов А.Д., Гоголев А.С., Ерунцов В.В., Дульцев К.И., Шмаков А.Н., Андреев М.В.
Дифрактометр высокого разрешения станции 1-2 «Структурная диагностика» 178

СД-I-24
Ташкеев Н.А.
Расчёты ключевых параметров генерирующей структуры и канала вывода ИК-излучения для станции «ИК-диагностика» синхротронного источника «СКИФ» 180

СД-I-25
Марченко М.А., Шакиров Д.С., Шакиров С.Р.
Нейросетевая модель регулируемой маски фронтенда ЦКП «СКИФ» как основа его цифрового двойника 182

II. Теоретические и прикладные аспекты экспериментальных методов, использующих синхротронное излучение ЦКП СКИФ 184

СД-II-01
Акимова К.А., Овчинникова Е.Н., Орешко А.П., Дмитриенко В.Е.
Температурные эффекты в спектрах запрещенных отражений в водородосодержащих кристаллах 184

СД-II-02
Антропова К.А.
Исследование алюмооксидной керамики, содержащей гексаалюминат бария 185

СД-II-03
Тихонов А.М., Волков Ю.О.
Резонансно-аномальная рефлектометрия ионов Rb+ на поверхности кремнеземных гидрозолей 187

СД-II-04
Гаврилова К.С., Трунова В.А., Крупович Е.С., Сороколетов Д.С., Легкодымов А.А.
Особенности золотосодержащих стандартных образцов при определении микроколичеств золота методом РФА-СИ 188

СД-II-05
Геонджиан А.Ю., Аксенов Д.А.
Рентгеновская спектроскопия (XAS/RIXS) катодных материалов 190

СД-II-06
Дихтяр Ю.Ю., Статник Е.С., Корсунский А.М., Абакумов А.М.
Исследование остаточных напряжений в Ni-обогащенных слоистых оксидах лития и переходных металлов с градиентным распределением переходных металлов в объеме агломерата 192

СД-II-07
Дубок А.С., Третьякова И.С., Рычков Д.А.
Комплексный подход к исследованию геометрии изгиба гибких органических кристаллов с использованием дифракционных методов (на примере пиразинамида и 1,3,5-трихлорбензола) 194

СД-II-08
Дударева А.А., Эмурлавев К.И.
Улучшение функциональных свойств хромоникелевой аустенитной стали методом вневакуумной электронно-лучевой наплавки Cr, Ni и B 196

СД-II-09
Иванов Ю.Ф., Прокопенко Н.А., Петрикова Е.А., Ахмадеев Ю.Х., Крысина О.В., Коваль Н.Н., Шмаков А.Н.
Использование синхротронного излучения для исследования процесса роста металлических пленок сплава TiNbZrTaHf 198

СД-II-10
Иванова Ю.А., Кудрявцев А.Л., Серебренникова П.С., Громилов С.А.
Повышение точности исследования поликристаллических материалов при съемке в геометрии Дебая-Шеррера. Аттестация нового рентгенографического эталона Y_2O_3 200

СД-II-11
Коротаев Е.В.
Функция аппаратурного искажения для моделирования структуры рентгеновских и рентгеноэлектронных спектров 202

СД-II-12
Коченева А.Г., Шарафутдинов М.Р., Лемзяков А.Г.
Применение метода рентгеновской рефлектометрии для исследования свойств тонких пленок, полученных при разных режимах вакуумного напыления 204

СД-II-13
Крупович Е.С., Трунова В.А., Войтко М.С., Гаврилова К.С.
Метод РФА-СИ для анализа биофункциональных групп химических элементов в красном костном мозге у пациентов с гемобластозами 205

СД-II-14
Кудрявцев А.Л., Улыбин Д.А.
Повышение точности измерения параметров элементарной ячейки монокристаллов с использованием дополнительного детектора 207

СД-II-15
Кутькин О.М., Хомяков Ю.В., Ракшун Я.В., Скляров А.Н., Веригин С.А.
Дозоэффективная рентгеновская микроскопия биологических образцов с нанометровым эффективным разрешением 209

СД-II-16
Лазуренко Д.В., Довженко Г.Д., Александрова Н.С., Шикалов В.С., Кузьмин Р.И.
Структура и свойства защитных слоев на основе модифицированного медью $TiAl_3$, сформированных на титановых заготовках 211

СД-II-17
Лакиенко Г.П., Фефелов М.А., Бобылева З.В., Дрожжин О.А., Антипов Е.В.
Исследование углеродных анодных материалов для аккумуляторов с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния 213

СД-II-18
Легкодымов А.А., Лапшин К.А., Золотарёв К.В.
Использование высокоэнергетического рентгеновского синхротронного излучения (60-120 кэВ) накопительного кольца ВЭПП-4М для количественного анализа РЗЭ методом РФА-СИ 215

СД-II-19
Лихачева А.Ю., Арсланов Т.Р., Ращенко С.В., Завьялов А.П.
Применение алмазной ячейки для изучения фазовых диаграмм интерметаллических соединений методом порошковой рентгеновской дифрактометрии 216

СД-II-20
Андрюшин Н.Д., Суханов А.С., Коршунов А.Н., Павловский М.С., Райн М.С., Никитин С.Е.
Фононная топология и особенности распределения спектрального веса в графите 218

СД-II-21
Овсянник В.В., Золотарев К. В.
Разработка методик проведения XAFS исследований на сверхпроводящем ондуляторе СКИФ.....219

СД-II-22
Орешко А.П.
Синхротронное излучение для испытаний полупроводниковых изделий электронной техники космического назначения.....221

СД-II-23
Данилкин М.И., Патолятов А.Д., Переведенцева Е.П., Колымагин Д.А., Маттитал Р.П., Пруцков Г.В., Витухновский А.Г.
Радиационная устойчивость полимерных рентгеновских составных преломляющих линз.....222

СД-II-24
Платунов М.С.
Поляризационная спектроскопия рентгеновского поглощения для выполнения фундаментальных исследований современных магнитных материалов.....224

СД-II-25
Пономарева Е.А., Чумаков Р.Г., Маслова С.А., Герасимов Е.Г., Мушников Н.В., Кузнецова Т.В.
Исследование электронной структуры редкоземельного интерметаллида $TbCo_2Ni_{0,1}$ методом резонансной фотоэмиссионной спектроскопии.....226

СД-II-26
Статник Е.С., Горшкова Ю.Е., Жеребцов Д.Д., Садыкова Ю.А., Салимон А.И., Корсунский А.М.
Исследование эволюции наноструктуры СВМПЭ при нагреве методами ШУРР/МУРР.....228

СД-II-27
Сычкова Д.С., Серебренникова П.С., Громилов С.А., Григорьева В.Д.
Разработка методики определения ориентации затравок для получения крупных монокристаллов системы Li-Na-Mo-O.....230

СД-II-28
Трунова В.А.
Рентгенофлуоресцентный анализ с использованием синхротронного излучения, методики анализа образцов различной природы.....232

СД-II-29
Шамьюнов К.М., Тригуб А.Л.
Определение атомарной и электронной структуры золота в гидротермальных растворах методами XANES спектроскопии.....234

III. Новые алгоритмы обработки данных, искусственный интеллект и машинное обучение при массовом анализе данных ЦКП СКИФ 236

СД-III-01
Ведькал А.В., Ивлев А.А., Колыбалов Д.С., Кадцын Е.Д.
Молекулярная динамика как метод построения структурных гипотез для синхротронных исследований 236

СД-III-02
Колупанова М.А., Зубов А.С., Кондратюк Н.Д., Герке К.М.
Анализ топологии материалов по их трехмерным изображениям, полученным с помощью синхротронного источника излучения 238

СД-III-03
Киряева Т.А., Купер К.Э., Лихачев А.В., Тулиглович Д.М.
Рентгеновская томография нестационарной внутренней структуры нагруженного образца угля 240

СД-III-04
Савин С.С., Тригуб А.Л.
Методология явного учета тепловых колебаний жестких атомных фрагментов при моделировании спектров поглощения рентгеновского излучения 242

СД-III-05
Тригуб А.Л.
GPU ускорение подгонки EXAFS спектра эволюционным алгоритмом 243

IV. Структура катализаторов и функциональных материалов на основе синхротронной диагностики 244

СД-IV-01
Айдаков Е.Е., Сараев А.А., Куренкова А.Ю., Яшник С.А., Каичев В.В.
***In situ* XAS исследование активных центров катализаторов на основе оксидов молибдена, нанесенных на TiO_2, в реакции селективного окисления метанола** 244

СД-IV-02
Акимов Ал.С., Коголев Д.А., Акимов А.С.
Спектроскопические исследования рентгеноаморфных соединений молибдена 245

СД-IV-03
Александров А.А. Седов В.С., Мартьянов А.К., Тяжелов И.А., Ясыркина Д.С., Захарова А.С., Ширманкин А.В., Воронов В.В., Кузнецов С.В.
Пленочные алмазные композиты, демонстрирующие люминесценцию эрбия 246

СД-IV-04
Александрова Н.С., Пруцков Г.В., Лазуренко Д.В.
Исследование пределов растворимости меди в кубическом триалюминиде титана посредством диффузионной пары Cu-$TiAl_3$ 247

СД-IV-05
Бабитова Е.С., Бречалов А.А., Серебрянских Р.А., Сахоненкова А.П., Мирославов А.Е.
Характеризация продуктов восстановления $^{99}Tc_2(CO)_{10}$ 249

СД-IV-06
Беляев Д.В., Титов А.А., Радзивончик Д.И., Патраков Е.И., Титова С.Г., Чумаков Р.Г., Титов А.Н., Королев А.В., Кузнецова Т.В.
Электронная структура и магнитные свойства $Ti_{1-x}Cr_x(Se_{0.8}S_{0.2})_2$ 250

СД-IV-07
Бердюгин С.Н., Николаев В.А., Асанова Т.И.
Анализ изменения структуры катализатора Rh/Al_2O_3 в ходе реакции перегруппировки оксим-амид методом EXAFS-спектроскопии 252

СД-IV-08
Валеев Р.Г., Бельтюков А.Н., Картапова Т.С.
РФЭС анализ термически и магнетронно осажденных пленок TiOx 253

СД-IV-09
Власов М.И., Чернышев С.В., Зайков Ю.П.
Структурные особенности расплава FLiNaK с добавкой фторидов РЗМ. Актуальность применения синхротронных методов для изучения его свойств 254

СД-IV-10
Корусенко П.М., Гаас В.А., Катин К.П., Виноградов А.С.
Сравнительное исследование структуры комплексов [M(Salen)] (M= Co, Ni, Cu) в конденсированном состоянии по данным рентгеновской абсорбционной спектроскопии и квантово-химических расчетов 256

СД-IV-11
Гайдамака А.А., Колыбалов Д.С.
Кристаллическая структура модулированной фазы трис(пиразол-1-ил)метана 258

СД-IV-12
Гайдамака А.А., Колыбалов Д.С., Лазаренко В.А., Наумов А.А.
Определение кристаллической структуры трис(3,5-диметилпиразол-1-ил)метана с использованием синхротронного излучения 259

СД-IV-13
Герцель И.С., Маликов А.Г.
Формирование интерфазы в композитах на основе ВТ-6/B_4C при прямом лазерном выращивании 260

СД-IV-14
Жданкин Г.И., Захаров Б.А., Болдырева Е.В.
Влияние высокого давления и низких температур на кристаллические структуры полиморфных модификаций парацетамола и его аналогов 262

СД-IV-15
Зверева В.В., Бельская О.Б., В.И. Зайковский, Трубина С.В..
Изучение локальной атомной структуры Pt и взаимодействия металл-носитель на разных стадиях приготовления катализатора 0.05-1%Pt/γ-Al_2O_3 методом XAFS, связь с каталитическими свойствами 264

СД-IV-16
Храпова Е.К., Омаров Ш.О., Иванова А.А., Кириленко Д.А., Красилин А.А.
Структурированные катализаторы на основе нанотубулярного гидросиликата $(Ni,Co)_3Si_2O_5(OH)_4$ для паровой конверсии глицерина 266

СД-IV-17
Каичев В.В., Винокуров З.С., Сараев А.А., Лалетина С.С., Шор Е.А., Юданов И.В.
Влияние растворенного углерода на активацию метана на палладии 267

СД-IV-18
Калганов Д.А., Бауман Д.А., Панов Д.Ю., Спиридонов В.А., Иванов А.Ю., Романов А.Е.
Исследование реальной структуры объёмных кристаллов оксида галлия 269

СД-IV-19
Калинина П.П., Захаров Б.А., Болдырева Е.В.
Исследование структуры фотоинертного представителя фоточувствительных комплексов, $[Co(NH_3)_5NO_2]C_3H_2O_4$, при варьировании температуры и давления 270

СД-IV-20
Еселевич Д.А., Шевченко В.Г., Конюкова А.В., Винокуров З.С., Толочко Б.П.
Использование метода синхротронного излучения с целью оптимизации энергетических и механических свойств порошков Al 272

СД-IV-21
Шефер К.И., Корытцева А.К., Князев А.В.
Изучение локальной структуры карбонатов лантанидов методом PDF 273

СД-IV-22
Сараев А.А., Кремнева А.М., Айдаков Е.Е., Проценко Б.О., Гуда А.А., Сафонова О.В., Каичев В.В.
***Operando* XANES-FTIRS исследование дегидрирования этанола на монослойных V_2O_5/TiO_2 и V_2O_5/CeO_2 катализаторах** 275

СД-IV-23
Кривенцов В.В.
Возможности метода рентгеновской спектроскопии поглощения для диагностики состояния и локальной структуры функциональных наноматериалов 277

СД-IV-24
Кривенцов В.В., Байрамуков В.Ю.
Исследование (методом XAFS) модельных металлоуглеродных нанокомпозитов, перспективных для задач атомной промышленности 278

СД-IV-25
Кривенцов В.В.
Структурное исследование модифицированных оксидов циркония методом рентгеновской спектроскопии поглощения 279

СД-IV-26
Кудияров В.Н., Эльман Р.Р., Курдюмов Н., Кенжиев А., Лаптев Р.С., Сыртанов М.С.
Применение синхротронного излучения для *in situ* рентгенодифракционного исследования десорбции водорода из композитов на основе гидрида магния с добавлением наноразмерных катализаторов 281

СД-IV-27
Кузнецов С.В., Седов В.С., Мартьянов А.К., Тяжелов И.А., Александров А.А., Ясыркина Д.С., Захарова А.С., Ширманкин А.В., Коршунов В.М., Цориева А.В., Тайдаков И.В., Воронов В.В.
РЗЭ-Люминесцентные алмазные композиты с пленочной и ядро-оболочка архитектурами 282

СД-IV-28
Куренкова А.Ю., Харина С.Н., Сараев А.А.
Катализаторы на основе окисленного g-C_3N_4 с малым содержанием Pt для получения водорода 283

СД-IV-29
Булушева Л.Г., Федосеева Ю.В., Лаврухина С.А., Сысоев В.И., Максимовский Е.А., Макарова А.А., Окотруб А.В.
Изучение влияния подложки и отжига на сенсорные свойства дисульфида молибдена методами РФЭС и NEXAFS 285

СД-IV-30
Лев Л.Л., Строков В.Н., Зенкевич А.В.
Использование метода ARPES в области мягкого рентгеновского спектра для исследования границы раздела HfO_2/Si и других материалов для микроэлектроники 287

СД-IV-31
Лихацкий М.Н., Воробьев С.А., Томашевич Е.В.
Опыт и перспективы использования синхротронного излучения в исследованиях наночастиц и слоистых материалов по тематикам ИХХТ СО РАН 289

СД-IV-32
Максимова К.Ю., Грунин А., Киричук Г.В., Швец П.В., Гойхман А.И.
Компактные установки импульсного лазерного осаждения для in situ экспериментов на синхротронных и нейтронных источниках 291

СД-IV-33
Мацаев Б.А., Лучинин Н.Д., Федотов С.С.
Железосодержащие фосфаты со структурой α-$CrPO_4$ как катодные материалы для натрий-ионных аккумуляторов 293

СД-IV-34
Меренцов А.И., Шкварин А.С., Кузнецова А.Ю., Королёва А.В., Жижин Е.В., Чумаков Р.Г., Титов А.Н.
Применение методов рентгеновской спектроскопии с использованием СИ для исследования электронной структуры твёрдых растворов $Zr_xTi_{1-x}Ch_2$ (Ch = S, Se) 295

СД-IV-35
Михейкина А.А., Голубков В.А., Маляр Ю.Н., Таран О.П.
Азопроизводные лигнина как современные полимеры для медицины, защиты окружающей среды и функциональных материалов 297

СД-IV-36
Михненко М.Д., Черепанова С.В., Пахарукова В.П., Булавченко О.А.
Исследование дефектной структуры катализатора NiO-SiO_2 299

СД-IV-37
Овсянников А.С., Соловьёва С.Е., Антипин И.С.
Использование синхротронного излучения для анализа пористых металл-органических супрамолекулярных «клеток» и материалов на их основе 300

СД-IV-38
Окотруб А.В., Семушкина Г.И., Ворфоломеева А.А., Седельникова О.В., Булушева Л.Г.
Электронные взаимодействия в заполненных углеродных нанотрубках по данным рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии 301

СД-IV-39
Панафидин М.А., Бухтияров А.В., Мартьянов А.О., Федоров А.Ю., Просвирин И.П., Бухтияров В.И.
Адсорбционно-индуцированная сегрегация как инструмент управления составом поверхности модельных биметаллических Pd-Co/ВОПГ катализаторов 302

СД-IV-40
Панина М.В., Якушев И.А.
Ацетатные комплексы Pt(II) и Pd(II) с гомологами пиридина — предшественники нанесенных катализаторов..... 304

СД-IV-41
Пахарукова В.П., Рогожников В.Н., Харченко Н.А., Стонкус О.А., Сараев А.А., Горлова А.М., Потемкин Д.И.
Разработка метода синтеза биметаллических катализаторов Fe-Pt/$Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ для процесса паровой конверсии CO с использованием методов рентгеновской дифракции для контроля состава и структуры материалов..... 306

СД-IV-42
Петрикова Е.А., Иванов Ю.Ф., Прокопенко Н.А., Коваль Н.Н., Шмаков А.Н.
Особенности процесса роста металлических и нитридных покрытий на основе высокоэнтропийных сплавов, выявленные методами синхротронного излучения 307

СД-IV-43
Петров И.Ю., Яценко Д.А.
Алгоритм уточнения параметров кристаллической решетки с применением формулы Дебая по дифракционным данным..... 308

СД-IV-44
Плиева Д.С., Анохин Д.В.
Особенности кристаллизации пленок ПВДФ, модифицированных методом ионного облучения 310

СД-IV-45
Пригородова А.Н., Созинов С.А., Шмаков А.Н.
In-situ исследование высокотемпературной карбонизации коксов с применением синхротронного излучения..... 311

СД-IV-46
Пригородова А.Н., Захаров Н.С., Шмаков А.Н., Адодин Н.С.
Исследование структуры наночастиц Fe-Pt, внедрённых в углеродную матрицу, методом рентгеновской дифракции на синхротронном излучении 312

СД-IV-47
Семушкина Г.И., Федосеева Ю.В., Шубин Ю.В., Пинаков Д.В., Окотруб А.В., Булушева Л.Г.
Фторированный графит как управляемая система для активации и термической деинтеркаляции диоксида азота 313

СД-IV-48
Синёва Л.О., Вашуркин Д.В., Иванов Д.А.
Щёточные полимеры на основе акрилатов и изучение процессов их самосборки 314

СД-IV-49
Смирнова Н.С., Храмов Е.В., Машковский И.С., Баева Г.Н., Мельников Д.П., Марков П.В., Стахеев А.Ю.
Комплексное исследование Pd-M (M=Au, Cu)/Al_2O_3 катализаторов с ультрамалыми содержаниями палладия методами XAFS и DRIFT спектроскопии 316

СД-IV-50
Дворцова П.А., Лобанова Е.Ю., Коровин А.М., Сутурин С.М.
Картографирование в синхротронном методе резонансной рентгеновской рефлектометрии для неразрушающего определения профилей химического состава, степени окисления и намагниченности по глубине 317

СД-IV-51
Сухарина Г.Б., Ермакова А.М., Гладченко-Джевелекис Я.Н., Корсун А.Е., Чекалина Е.В., Лысенко Е.Е., Шеметова Э.И., Авакян Л.А., Бугаев Л.А.
Структура медных центров цеолита-морденита по данным рентгеновской спектроскопии XANES 319

СД-IV-52
Ташланов М.Ю., Федотов С.С.
Исследование материалов для калий-ионных аккумуляторов на основе дефектных пирохлоров методами синхротронной и нейтронной дифракций 320

СД-IV-53
Турищев С.Ю., Беликов Е.А., Паринова Е.В., Коюда Д.А., Чувенкова О.А., Какулия Ю.С., Чумаков Р.Г., Лебедев А.М., Преображенская Е.В., Антипов С.С.
Термическая и ионная модификация биогибридного материала на основе молекул бактериоферритина Dps 322

СД-IV-54
Федоренко А.Д., Асанов И.П., Бердюгин С.Н., Гребенкина М.А., Николенко А.Д.
Влияние спин-орбитального взаимодействия на магнитные свойства и рентгеновские спектры галогенидных комплексов рения 323

СД-IV-55
Федосеева Ю.В., Городецкий Д.В., Федоренко А.Д., Булушева Л.Г., Седельникова О.В., Окотруб А.В.
Влияние химического состава поверхности поликристаллической алмазной пленки с графитовыми электродами на фотоотклик на рентгеновское излучение 325

СД-IV-56
Гусейнов Т.З., Хаметова Э.Ф., Бакиева О.Р.
Исследование деградации оксидного слоя в мемристивной системе TiOx 326

СД-IV-57
Храпова Е.К., Иванова А.А., Красилин А.А.
Структура и свойства нанотубулярных гидросиликатов состава $(Co_xNi_{1-x})_3Si_2O_5(OH)_4$ 327

СД-IV-58
Шкварин А.С., Дьячков Е.Г., Меренцов А.И., Королева А.В., Жижин Е.В., Чумаков Р.Г., Титов А.Н.
Электронная структура би-интеркалированного $Fe_xNi_yTiSe_2$ 328

СД-IV-59
Шурыгин А.В., Юдников Е.А., Зубченко В.Б., Немтинов В.И., Зернов Я.Г., Тригуб А.Л.
Электронная и пространственная структура УФ-Вид/ИК люминофоров по данным синхротронных методов 330

СД-IV-60
Менушенков В.П., Менушенков А.П., Щетинин И.В., Иванов А.А., Рогалев А.Л., Савченко А.Г., Жуков Д.Г.
Исследование методами рентгеновского кругового дихроизма и ПЭМ литых и закаленных сплавов $Fe_{50}Nd_{50}$ 332

СД-IV-61
Юргин А.Б., Руктуев А.А.
Структура и свойства покрытий на основе $Al_xCoCrFe_{0,2}Ni$ с добавкой частиц Cr_3C_2, полученных методом вневакуумной электронно-лучевой наплавки 334

V. Синхротронное излучение для структурной биологии 336

СД-V-01
Бережная О.М., Власкина А.В., Самыгина В.Р.
Кристаллизация и предварительный рентгеноструктурный анализ рекомбинантного апоферритина мыши 336

СД-V-02
Булгаков Н.А., Ендуткин А.В., Шевцов М.Б., Капранов И.А., Юдкина А.В., Борщевский В.И., Жарков Д.О.
Анализ взаимодействия критических аминокислотных остатков в активном центре эндонуклеазы VIII с основанием напротив повреждения в ДНК 337

СД-V-03
Гулимова В.И., Букреева И.Н., Юнеман О.А., Бузмаков А.В., Кривоносов Ю.С., Асадчиков В.Е., Савельев С.В.
Применение рентгеновской микротомографии в космической биологии: проблемы и перспективы 339

СД-V-04
Ивлев А.А., Колыбалов Д.С., Архипов С.Г.
Подходы к получению безводных твердых форм противовирусных соединений на примере противооспенного препарата тековиримата 341

СД-V-05
Каханова В.Д., Кошманова А.А., Лузан Н.А., Кичкайло А.С., Коловская О.С., Гаркуша Т.А., Грек Д.С., Морячков Р.В., Заблуда В.Н., Гогин А.А.
Визуализация внутриклеточного накопления гадолиний-содержащего контрастного вещества в глиоме с помощью рентгеновской микротомографии 343

СД-V-06
Ларичев Ю.В.
Изучение структуры белков методом малоуглового рассеяния: от растворов к твердому телу (Sorb SAXS) 345

СД-V-07
Низовский А.И., Шмаков А.Н., Легкодымов А.А., Бехтерева К.А., Феофилов. И.В.
Перспективы использования жёсткого рентгеновского излучения для анализа почечных камней in vivo 346

СД-V-08
Олейник Г.А., Канарская М.А., Рижиков Ю.Л., Баранова С.В.
Изучение олигомерных форм рекомбинантных лед-связывающих белков 347

СД-V-09
Смородина Е.Д., Морячков Р.В., Павлова Г.В., Кичкайло А.С.
Применение малоуглового рассеяния рентгеновских лучей для анализа структуры аптамеров и конформационных изменений 349

СД-V-10
Укладов Е.О., Беленькая С.В., Щербаков Д.Н., Шевцов М.Б., Борщевский В.И., Архипов С.Г.
Сравнение структур белков химозинов архара *Ovis ammon* и белого медведя *Ursus maritimus* 351

Список участников 353

Содержание 372

Научное издание

Международная конференция
Конгресс пользователей ЦКП СКИФ:
перспективные исследования с использованием синхротронного излучения
Сборник тезисов

17—21 ноября 2025 г., Новосибирск, Россия

Под общей редакцией акад. РАН В.И. Бухтиярова, акад. РАН Е.Б. Левичева, д.ф.-м.н. Я.В. Зубавичуса, д.х.н. А.В. Бухтиярова, к.ф.-м.н. И.А. Рубцова, к.ф.-м.н. А.А. Сараева

Составитель: М.С. Суворова
Компьютерная обработка: Ю.В. Климова, Т.О. Барсуков
Обложка: А.Р. Иммен

Издатель:
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»
630090, Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 5, ИК СО РАН
http://catalysis.ru
E-mail: bic@catalysis.ru Тел.: +7 383 330 67 71

Электронная версия:
Издательский отдел Института катализа СО РАН
E-mail: pub@catalysis.ru Тел.: +7 383 326 97 15

Объём: 27 МБ. Подписано к размещению: 14.11.2025.
Адрес размещения:
https://catalysis.ru/resources/institute/Publishing/Report/2025/skif-2025.pdf

Системные требования: i486; Adobe® Reader® (чтение формата PDF)

ISBN 978-5-906376-66-4

Сайт конгресса: