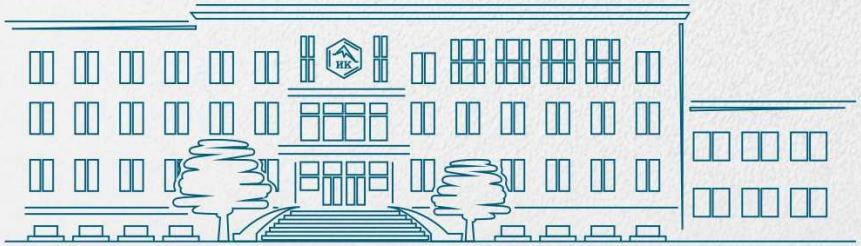
ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА
им. Г.К. БОРЕСКОВА

СКИФ

Станция 1-4 «XAFS-спектроскопия и магнитный дихроизм» ЦКП «Сибирский кольцевой источник фотонов (СКИФ)»



К.ф.-м.н. Сараев Андрей Александрович

Новосибирск, 2019

Основные научные задачи, решаемые на станции

Станция «XAFS-спектроскопии и магнитного дихроизма» предназначена для исследования локальной пространственной, электронной и магнитной структуры кристаллических и аморфных материалов, молекулярных кристаллов, примесей в сплавах, тяжелых элементов в биологической матрице с содержанием анализируемого элемента до 0.001%, а также жидкостей и газов.

- **жидкости, молекулярные растворы, жидкие кристаллы;**
- **кристаллические и поликристаллические материалы;**
- **аморфные и высокоразупорядоченные вещества;**
- **молекулы и макромолекулы, содержащие атомы металлов или в которых часть атомов замещена на тяжелые атомы.**

Доступные методики	**XANES, EXAFS, quick-EXAFS, XES, RIXS, магнитный дихроизм**
Детекторы	Ионизационные камеры Быстродействующие ионизационные камеры Флуоресцентный, германиевый, диодный детекторы Эмиссионные спектрометры
Энергетический диапазон	4.5 кэВ < E < 35-40 кэВ (от титана)
Размер пучка, мм	мин. 0.01×0.01 (μXAS); макс. 4×1
Тип образцов	Любой
Условия экспериментов	Жидкостный He криостат (4-300K) Пресс Париж-Эдинбург (17 ГПа, 2000K) Проточный реактор (T ≈1000K) с анализом газовой фазы с помощью хроматографа и масс-спектрометра Высокотемпературная печь с контролируемой атмосферой (300-3000K) ИК-спектроскопия, UV-vis спектроскопия Газовая хроматография и масс-спектрометрия

Основные научные задачи, решаемые на станции

Блок задач 1. Катализаторы и каталитические технологии.

1.1. Характеризация катализаторов на основе оксидов и нанесенных моно- и биметаллических наночастиц.

1.2. In situ исследование генезиса формирования и стабильности активных компонент промышленно-важных катализаторов.

1.3. Operando исследование функционирования гетерогенных катализаторов

1.4. In Situ и Operando исследование фотокатализаторов для получения водорода и восстановления CO_2

(ИК СО РАН, ИППУ СО РАН, ИНХ СО РАН, НИОХ СО РАН, ИХТТМ СО РАН, МГУ, ТПУ, ТГУ, НГУ, СКТБ «Катализатор», «СИБУР», «Газпром-Нефть»)

Блок задач 2. Функциональные материалы

2.1. Исследование аккумуляторов и топливных элементов.

2.2. Исследование конструкционных материалов, керамик, защитных покрытий.

2.3. Исследование магнитных материалов.

(ИК СО РАН, ИНХ СО РАН, НИОХ СО РАН, ИХТТМ СО РАН, МГУ, ТПУ, ТГУ)

Блок задач 3. Нанотехнологии.

3.1. Исследование металлорганических каркасных структур.

3.2. Исследование газовых сенсоров на основе наночастиц.

3.3. Исследование искусственных ферментов на основе атомов или наночастиц

(ИК СО РАН, ИНХ СО РАН, НИОХ СО РАН, ИХТТМ СО РАН, МГУ, ТПУ, ТГУ, НГУ)

Основные научные задачи, решаемые на станции

Блок задач 4. Науки о жизни и Земле, геология, защита окружающей среды.

4.1. Исследование биологических объектов

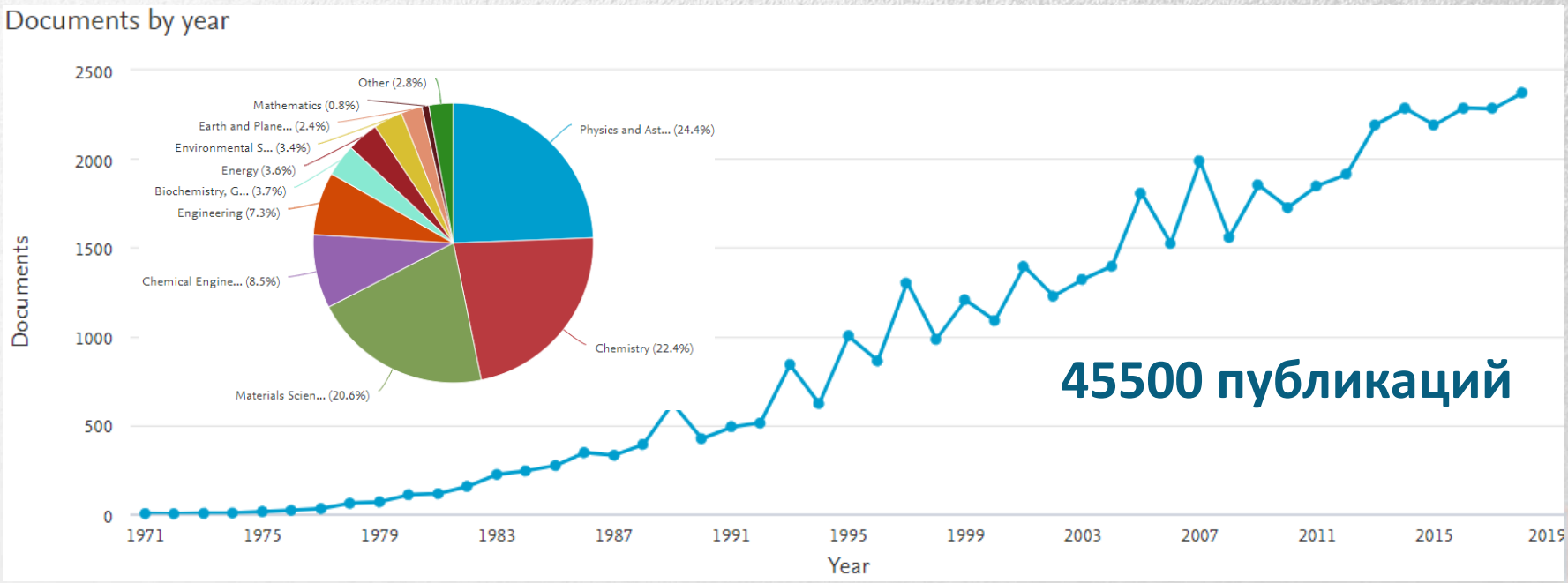
4.2. Исследование геологических объектов

4.3. Исследование материалов для рационального природопользования и защиты окружающей среды.

(ИК СО РАН, ИЦИГ СО РАН, ИНХ СО РАН, НИОХ СО РАН, ИХТТМ СО РАН, ИГМ СО РАН, ГИН СО РАН, МГУ, ТПУ, ТГУ, НГУ)

5. Пленки и интерфейсы

5.1. Изучение процессов осаждения и роста диэлектрических, полупроводниковых и металлических пленок **(ИНХ СО РАН, НИОХ СО РАН, ИФП СО РАН, МГУ, ТПУ, ТГУ, НГУ)**

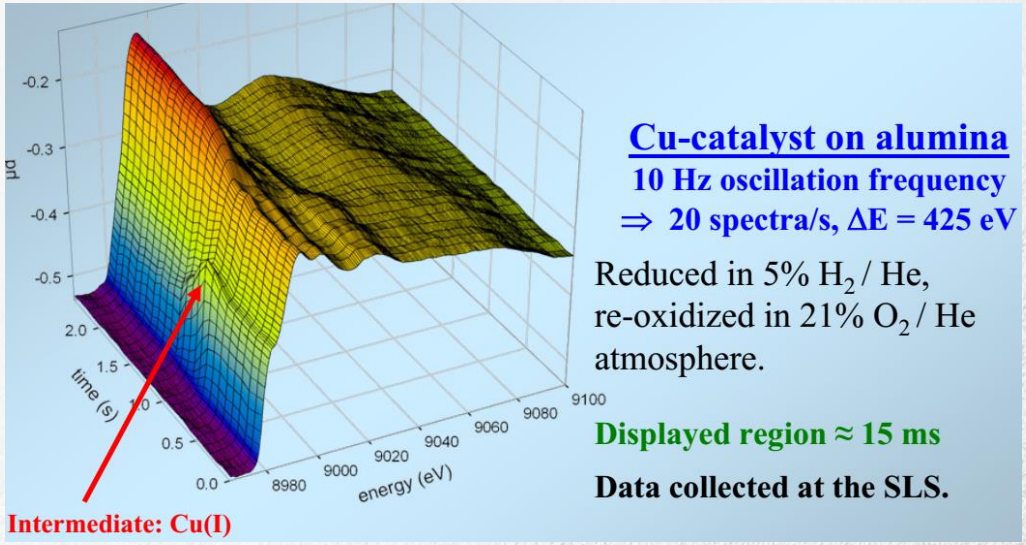


Экспериментальные методы

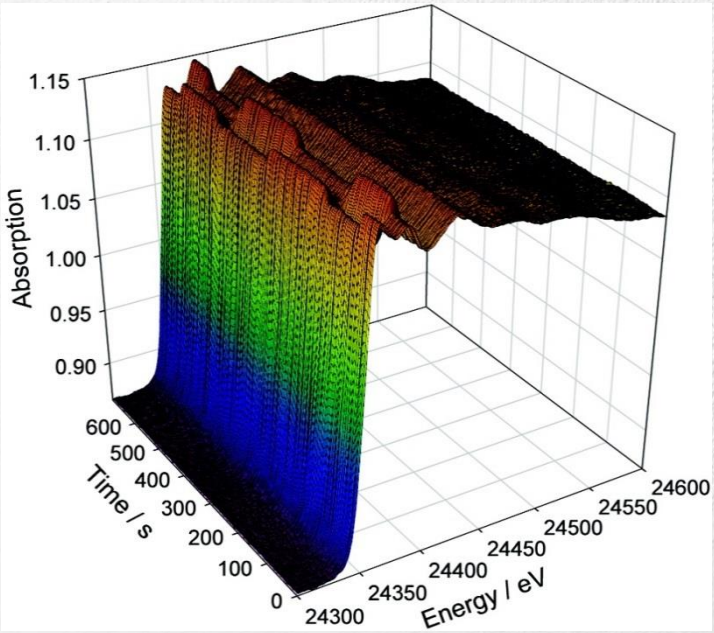
Для реализации экспериментальных методов, необходимых для решения исследовательских задач, на станции «XAFS-спектроскопия и магнитный дихроизм» предполагается организация трех секций:

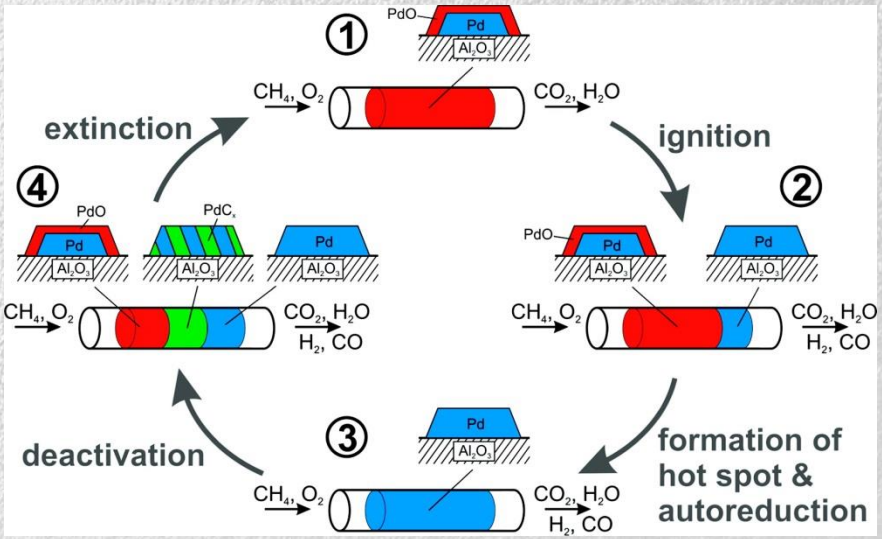
- «Спектроскопия рентгеновского поглощения» (секция 1-4-1 - XAS)
  - XANES/EXAFS в режиме регистрации на пропускание и выхода флуоресценкции
  - Quick-EXAFS (10 мс/1200-1500 эВ)
  - Флуоресцентный анализ
- «Рентгеновская эмиссионная спектроскопия» (секция 1-4-2 - XES)
  - XES (нерезонансная рентгеновская эмиссионная спектроскопия)
  - HERFD-XAS (флуоресцентный XAS с высоким энергетическим разрешением)
  - XRS/IXS (неупругое рентгеновское рассеяние)
  - RXES/RIXS (резонансная рентгеновская эмиссионная спектроскопия / резонансное неупругое рентгеновское рассеяние)
- «Спектроскопия кругового и линейного магнитного дихроизма» (секция 1-4-3 – XMCD/XMLD)
  - Магнитное поле до 14 Т
  - Температурный диапазон от 4 до 1200 К

Станция 1-4 – XAS и Quick XAS



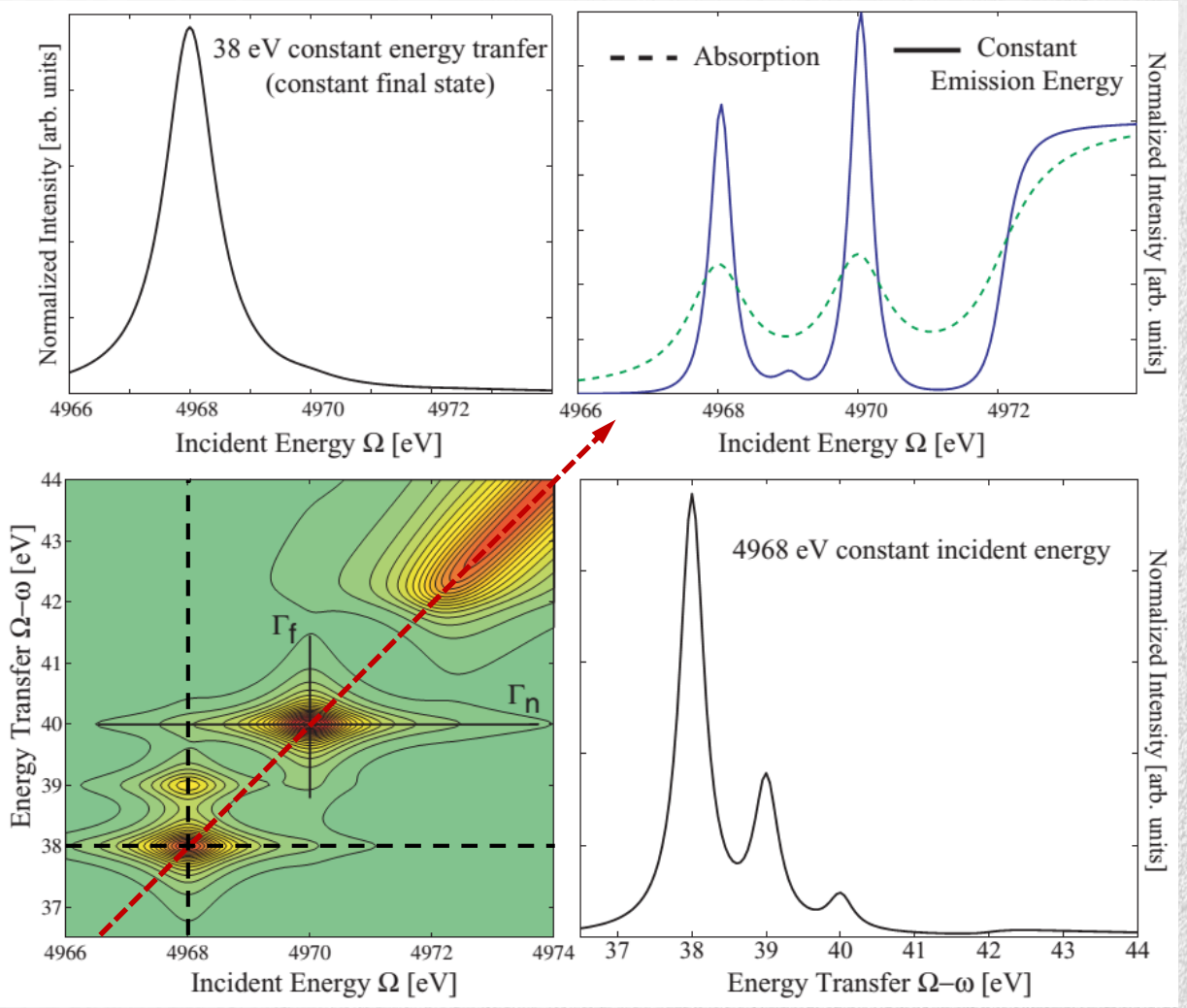
- Изучение структуры катализатора (наночастиц)
- Синтез катализатора и формирование активного компонента
- Исследование функционирующего катализатора
- Активация и дезактивация катализатора
- Изучение фазового и химического состава катализаторов





J. Stötzel, R. Frahm, B. Kimmerle, M. Nachtegaal, and J.-D. Grunwaldt, J. Phys. Chem. C 116, 599 (2012).

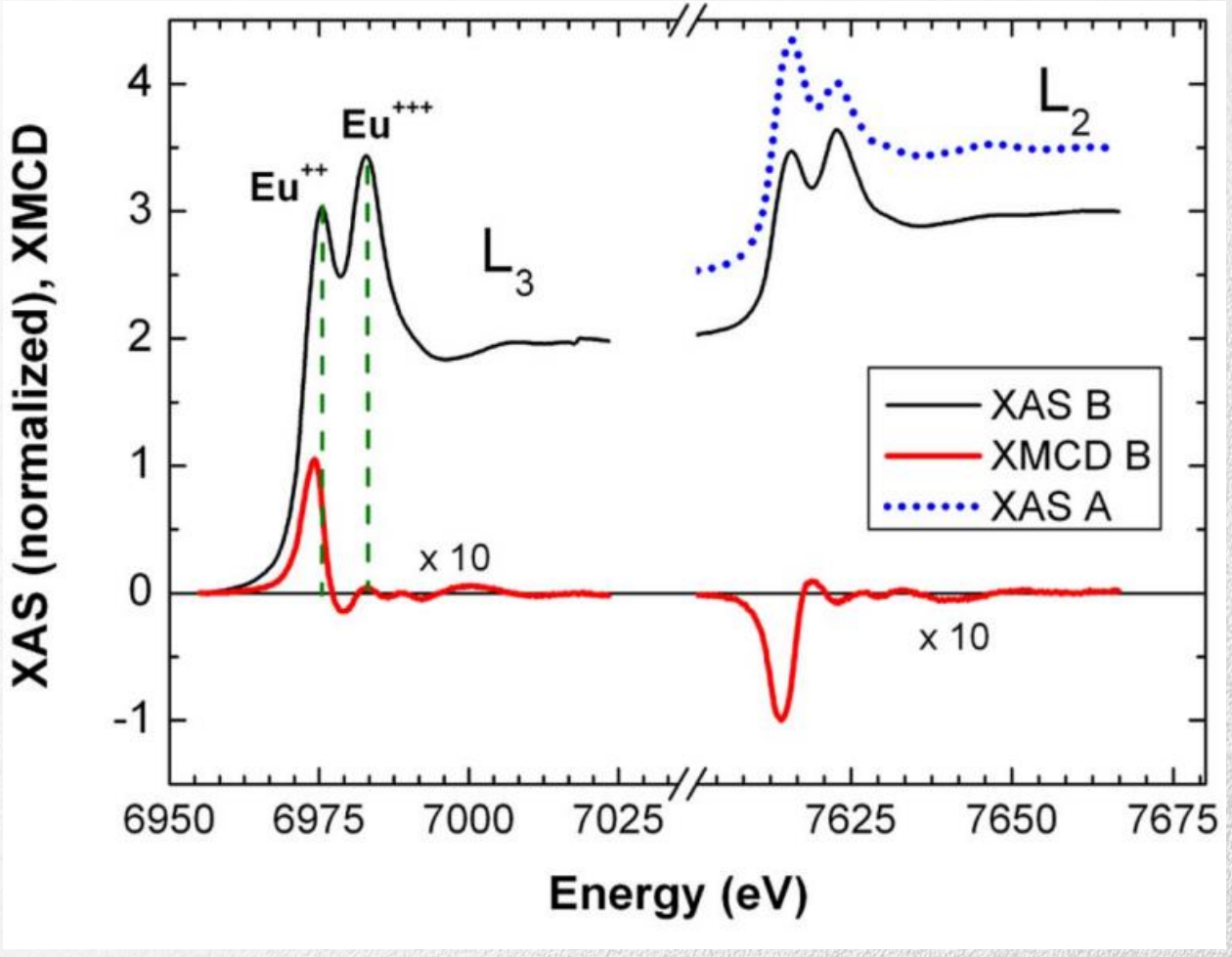
Станция 1-4 – Рентгеновская эмиссионная спектроскопия



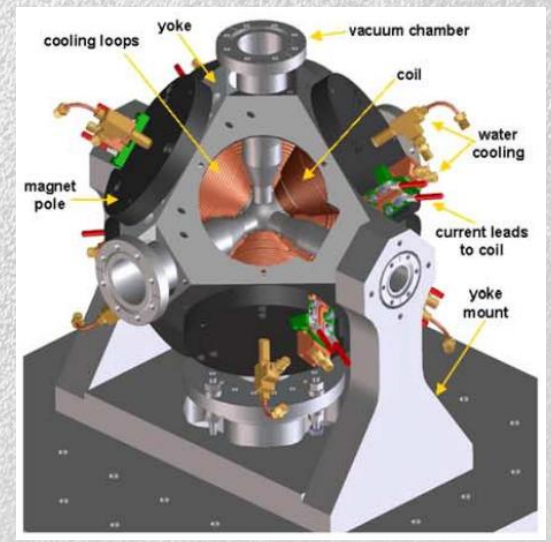
P. Glatzel, M. Sikora and M. Fernandez-Garcia, Eur Phys J-Spec Top 169 207-214 (2009)

- Определение типов лигандов
- Электронный/протонный перенос
- Активные центры белков
- Электронная структура с селективность по спину для ферро-, антиферро-, парамагнетиков и ферритов
- Определение валентности поглощающего атома
- Электронная структура f-уровней для материалов с аномальными свойствами
- Ультраразбавленные образцы
- Рамановская спектроскопия для легких элементов на жестком рентгеновском излучении (без вакуума, объемно-чувствительный метод)

Станция 1-4 – Спектроскопия магнитного дихроизма



- K-края 3d элементов
- $L_{2,3}$-края лантаноидов и актиноидов
- Магнитные свойства объектов для спинтроники
- Бионеорнанические объекты
- Магнитные материалы

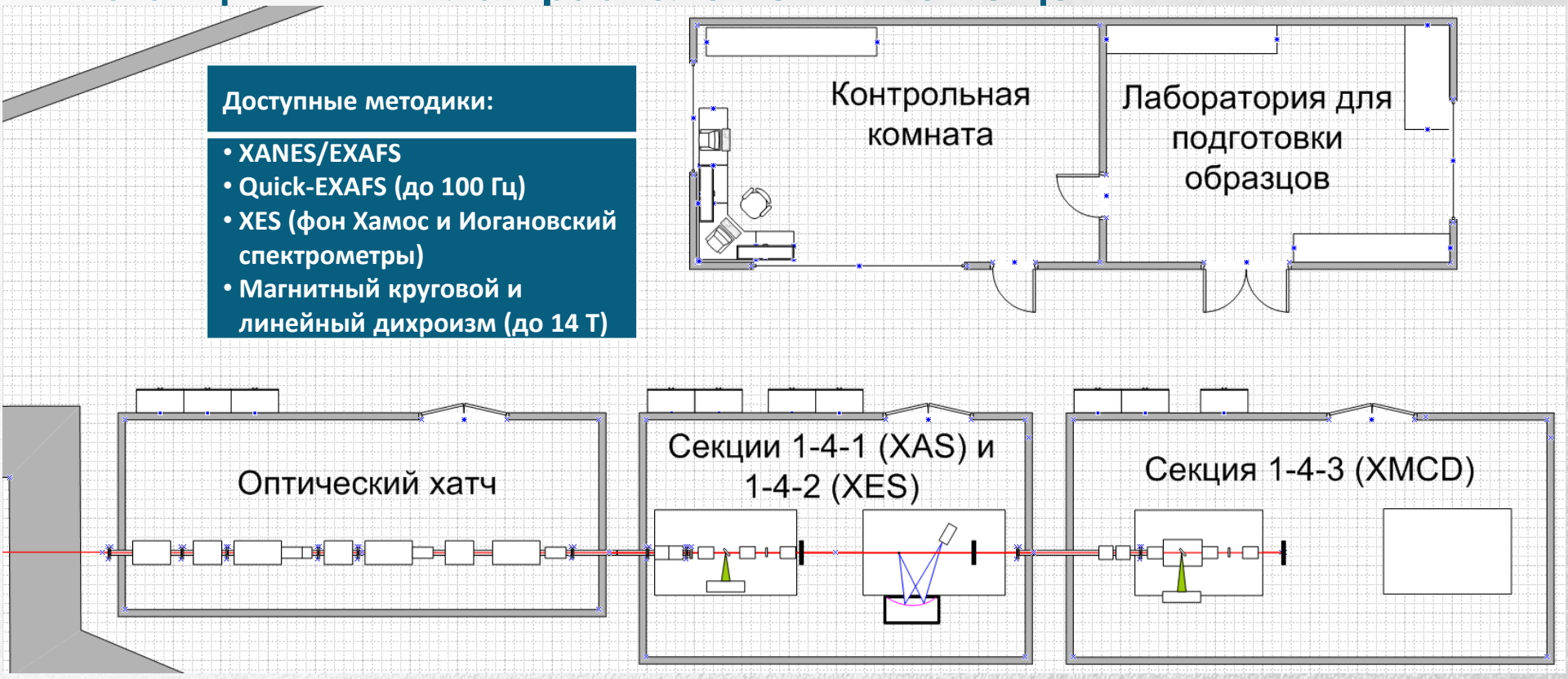


S. D. Pappas, P. Poulopoulos, B. Lewitz, A. Straub, A. Goschew, V. Kapaklis, F. Wilhelm, A. Rogalev, and P. Fumagalli, Scientific Reports **3**, 1333 (2013)

Станция 1-4 – План расположения помещений

Доступные методики:

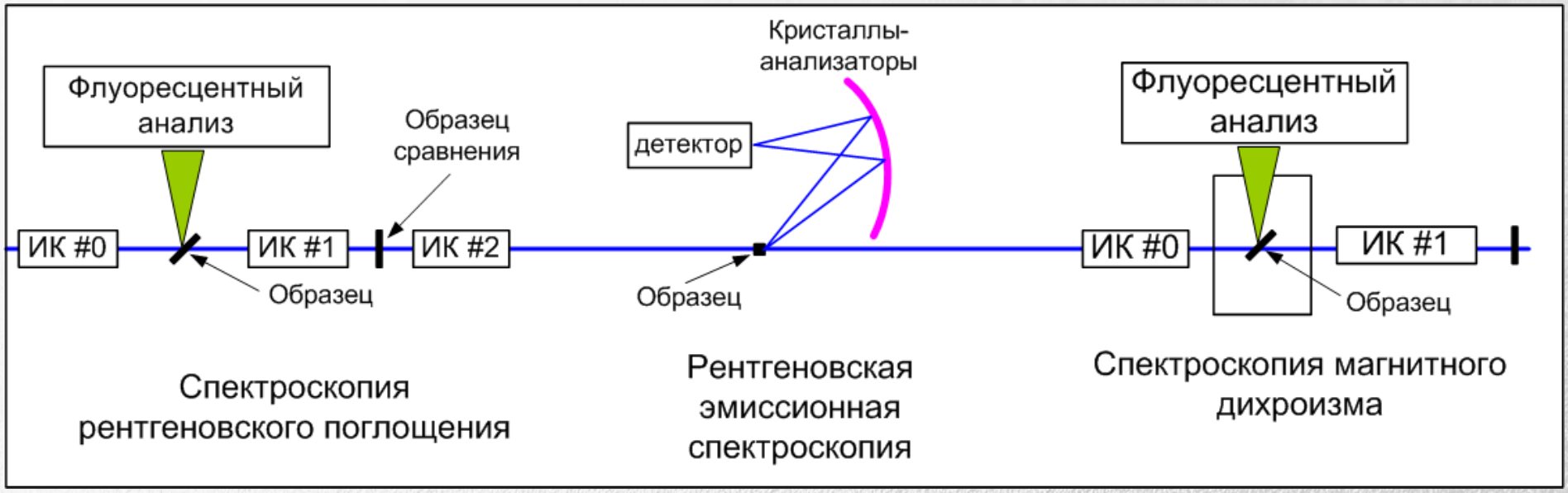
- XANES/EXAFS
- Quick-EXAFS (до 100 Гц)
- XES (фон Хамос и Иогановский спектрометры)
- Магнитный круговой и линейный дихроизм (до 14 Т)



Дополнительные методики:

- Оборудование для проведения in situ/operando исследований
- Жидкостный He криостат (4-300K)
- Пресс Париж-Эдинбург (17 ГПа, 2000K)
- Проточный реактор (T ≈1000K) с анализом газовой фазы с помощью хроматографа и масс-спектрометра
- Высокотемпературная печь с контролируемой атмосферой (300-3000K)
- ИК-спектроскопия, UV-vis спектроскопия одновременно с XAS/XES экспериментами

Станция 1-4 – Секции станции



Особенности (оборудование):

- **Новый тип источника СИ – сверхпроводящий ондулятор (ИЯФ)**
- **Два монохроматора: классический (FMB Oxford, Англия) и быстрый (RI, Германия)**
- **Два эмиссионных спектрометра (JJ Xray, Дания)**

Особенности (исследование):

- **От титана до церия (К-края)**
- **Остальные элементы на L_3-краях**
- **Геометрия: на пропускание (>1%) и по выходу флуоресценции (0.01-1%)**
- **In situ/operando исследования с одновременной записью ИК-спектров (DRIFTS-XAS эксперименты)**
- **Эмиссионная спектроскопия: разрешение до 100 мэВ и концентрации до 0.001%**

Станция 1-4 – Развитие

Временная шкала:

- 2019 – подготовка концептуального проекта
- 2019-2020 – подготовка технического проекта
- 2021-2023 – закупка оборудования
- 2023-2024 – монтаж и пуско-наладочные работы
- 2024 – первые результаты
- с 2026 работа с внешними пользователями

Постоянный персонал:

- Начальник станции (1 человек)
- Ответственный за секцию (2 человека)
- Инженер (1 человек)
- Научный персонал:
  - 3 научных сотрудника
  - 4-5 аспирантов
  - 5-6 студентов
- Внешние пользователи:
  - 50-60% времени
  - 10-15 групп в год

Станции-аналоги:

- SuperXAS@SLS (Швейцария)
- P64/P65 @PETRAIII (Германия)
- CAT-ACT@ANKA (Германия)
- Balder@MAX IV (Швеция)
- ROCK@Soleil (Франция)
- BM23@ESRF (Франция)

Организации-участники

ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА им. Г.К. БОРЕСКОВА

ИНХ СО РАН

Институт ядерной физики имени Г. И. Будкера СО РАН

Основные организации-пользователи

- Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН
- Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН
- Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН
- Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН
- Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
- Институт химии и химической технологии СО РАН
- Институты УрО РАН и ДВО РАН

НИОХ

Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева

ИХТТМ

ИрИХ СО РАН

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Новосибирский государственный университет *НАСТОЯЩАЯ НАУКА

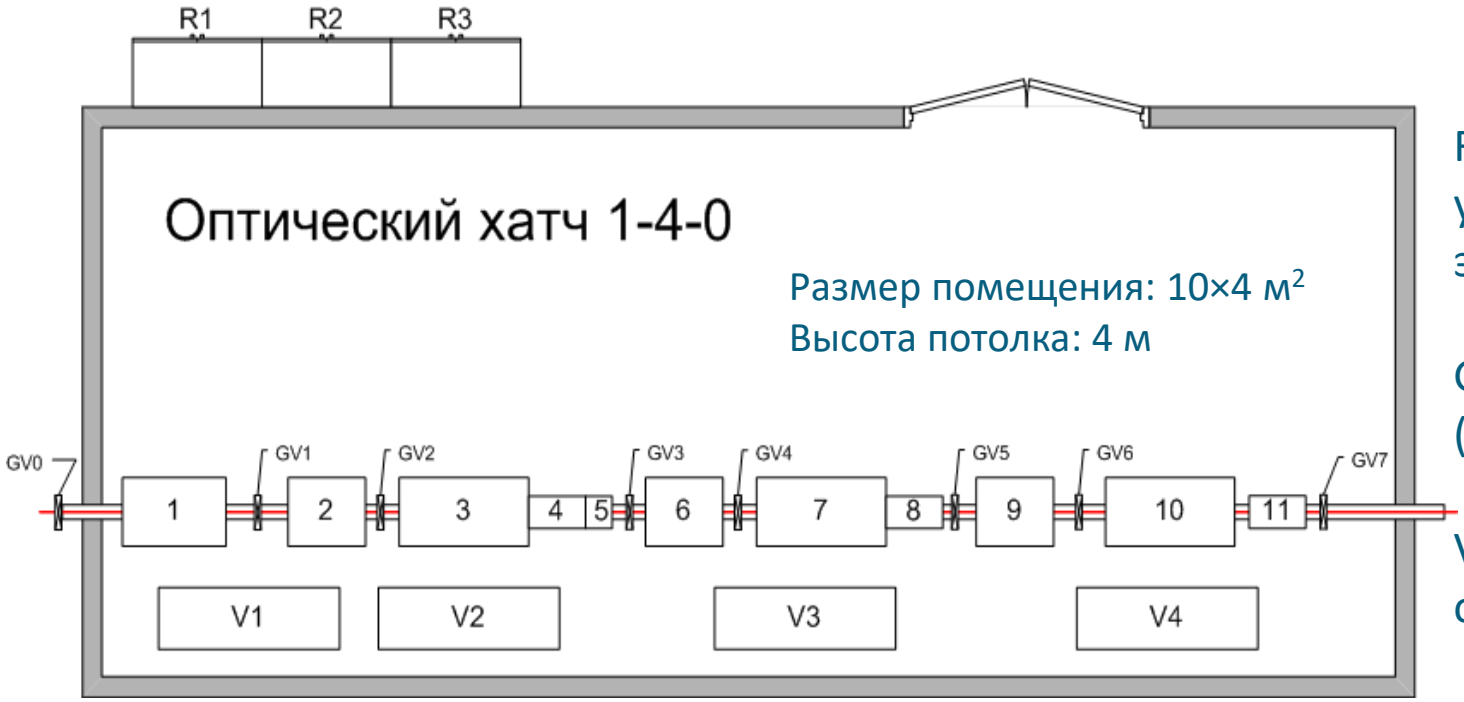
НГТУ

Станция 1-4 – Стоимость станции

Секция/система	Стоимость, млн. руб.
Спектроскопия рентгеновского поглощения (XAS)	417 339.00
Рентгеновская эмиссионная спектроскопия (XES)	161 313.00
Спектроскопия магнитного дихроизма	115 310.00
Вспомогательное оборудование помещений	50 727.00
Система транспортировки пучка	70 000.00
Система Управления (ПО)	20 000.00
Система безопасности	30 000.00
Работы по монтажу	10 000.00
Пуско-наладочные работы	5 000.00
Итоговая стоимость	879 689.00

Спасибо за внимание

ЭКСПЛИКАЦИЯ ПОМЕЩЕНИЙ 1-4-0 Оптический хатч (1 из 5)



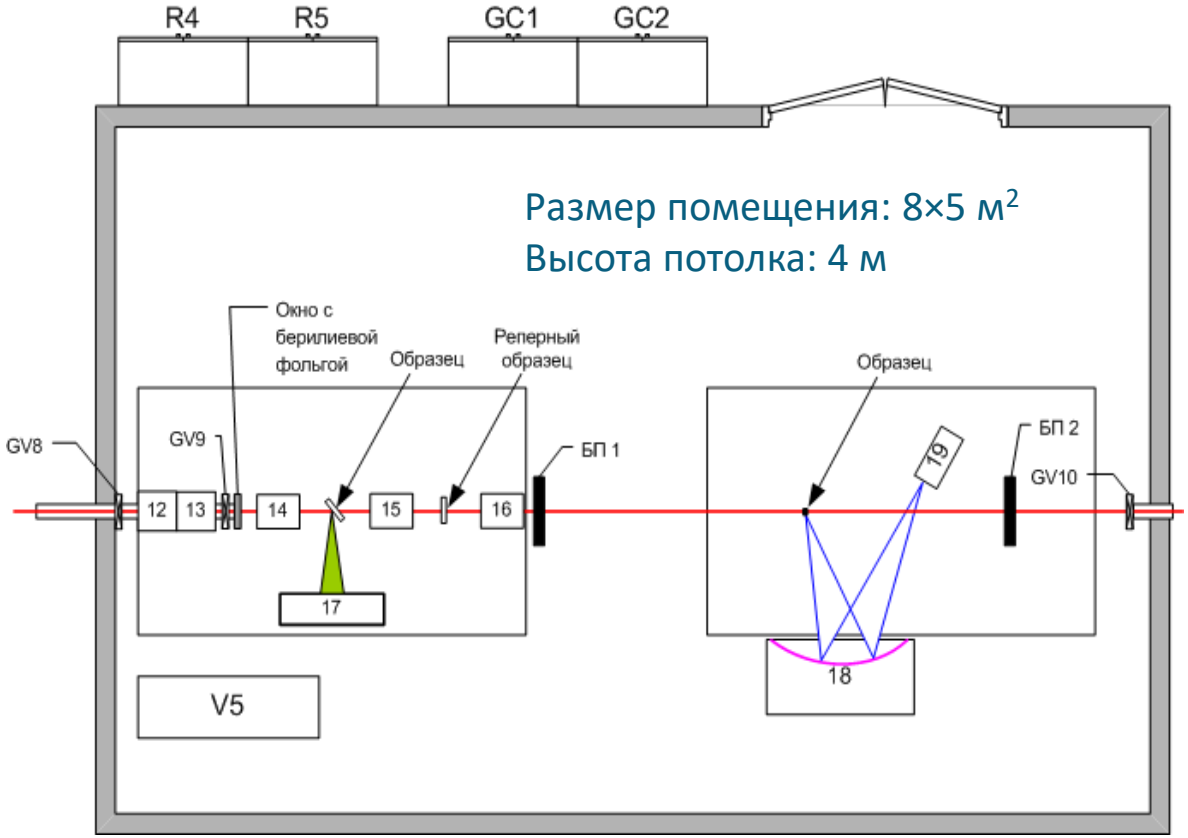
R1-R3 – стойки с управляющей электроникой

GV1-GV7 – gate valve (шибер)

V1-V4 – вакуумное оборудование

1 – Входная 4х створчатая щель и блок низкоэнергетических фильтров;
2 – Диагностический модуль 1;
3 – Двухкристалльный монохроматор;
4 – поглотитель «розового» излучения;
5 – монитор интенсивности пучка;
6 – Диагностический модуль 2;
7 – Быстродействующий монохроматор;
8 – поглотитель «розового» излучения;
9 – Диагностический модуль 3;
10 – Система микрофокусировки;
11 – Радиационная заслонка.

ЭКСПЛИКАЦИЯ ПОМЕЩЕНИЙ 1-4-1 и 1-4-2 (2 из 5)



R4-R5 – стойки с управляющей электроникой

GC1-GC2 – вентилируемый шкаф для установки газовых баллонов

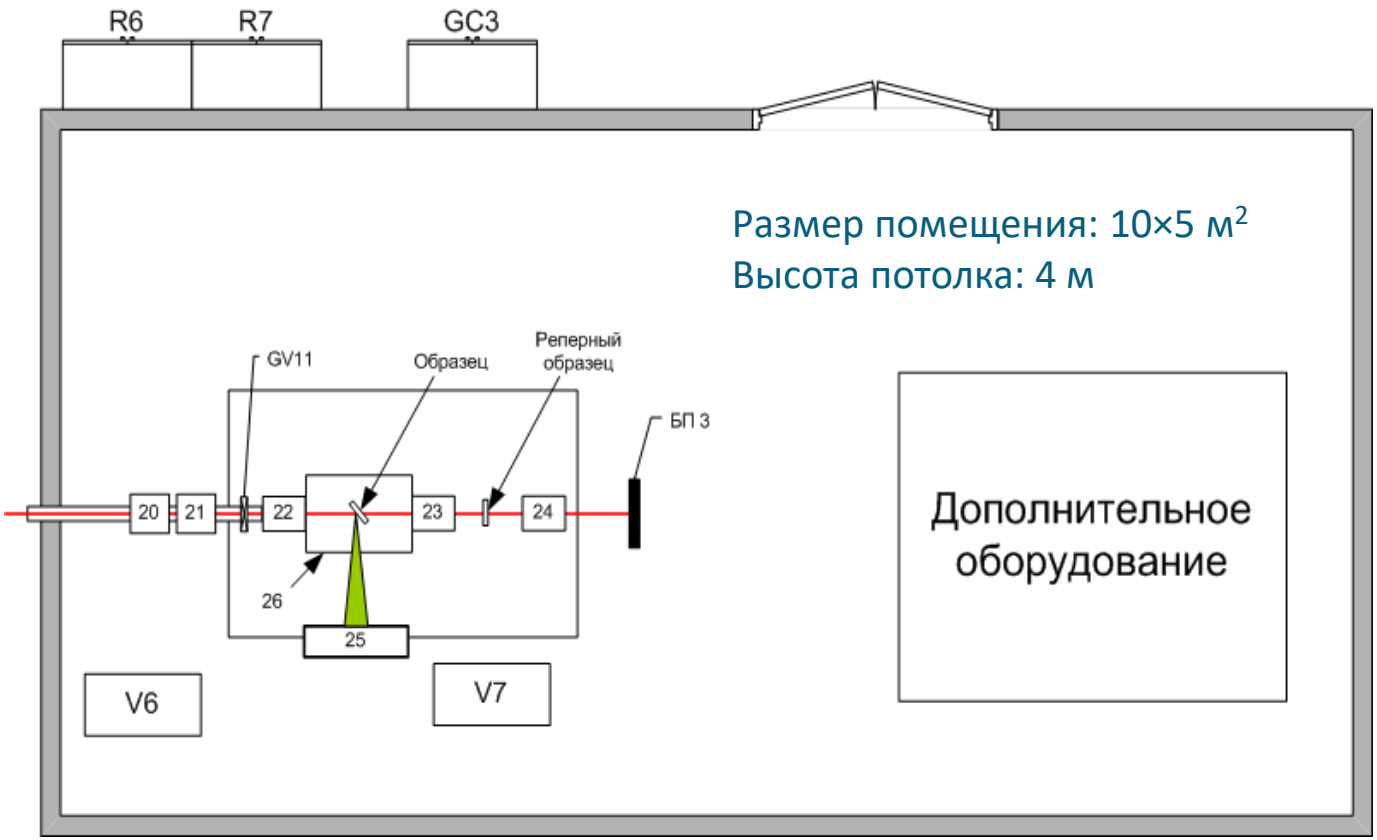
GV8-GV10 – gate valve (шибер)

V5 – вакуумное оборудование

БП1-БП2 – блок-поглотитель синхротронного излучения

12 – Входная 4х створчатая щель и блок фильтров;
13 – Диагностический модуль 4;
14-16 – Ионизационные камеры;
17 – Флуоресцентный детектор;
18 – Кристаллы-анализаторы и система их позиционировани;
19 – Детектор и система позиционирования.

ЭКСПЛИКАЦИЯ ПОМЕЩЕНИЙ СТАНЦИЯ 1-4-3 (3 из 5)



R6-R7 – стойки с управляющей электроникой

GC3 – вентилируемый шкаф для установки газовых баллонов

GV11 – gate valve (шибер)

V6-V7 – вакуумное оборудование

БП3 – блок-поглотитель синхротронного излучения

20 – Фазовый преобразователь и поляриметр;
21 – Диагностический модуль 5;
22-24 – Ионизационные камеры;
25 – Флуоресцентный детектор;
26 – Сильнопольный магнит (14Т) с системой позиционирования образца

ЭКСПЛИКАЦИЯ ПОМЕЩЕНИЙ контрольная комната и лаборатория (4 из 5)

Размер помещения: 8.5×5 м^2
Высота потолка: 3.5 м

Размер помещения: 7×5 м^2
Высота потолка: 3.5 м

Количество рабочих мест: 4

Количество рабочих мест: 2