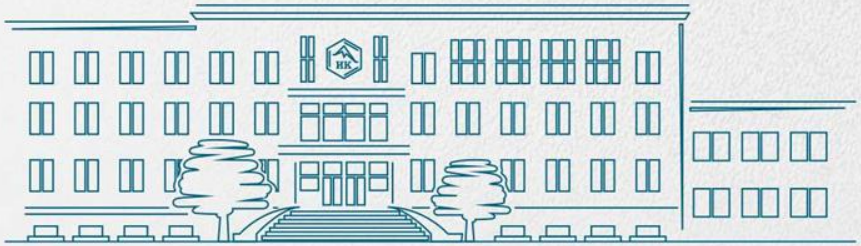
BORESKOV INSTITUTE OF CATALYSIS

СКИФ

Станция 1-6: «Электронная структура» – ЦКП «СКИФ»

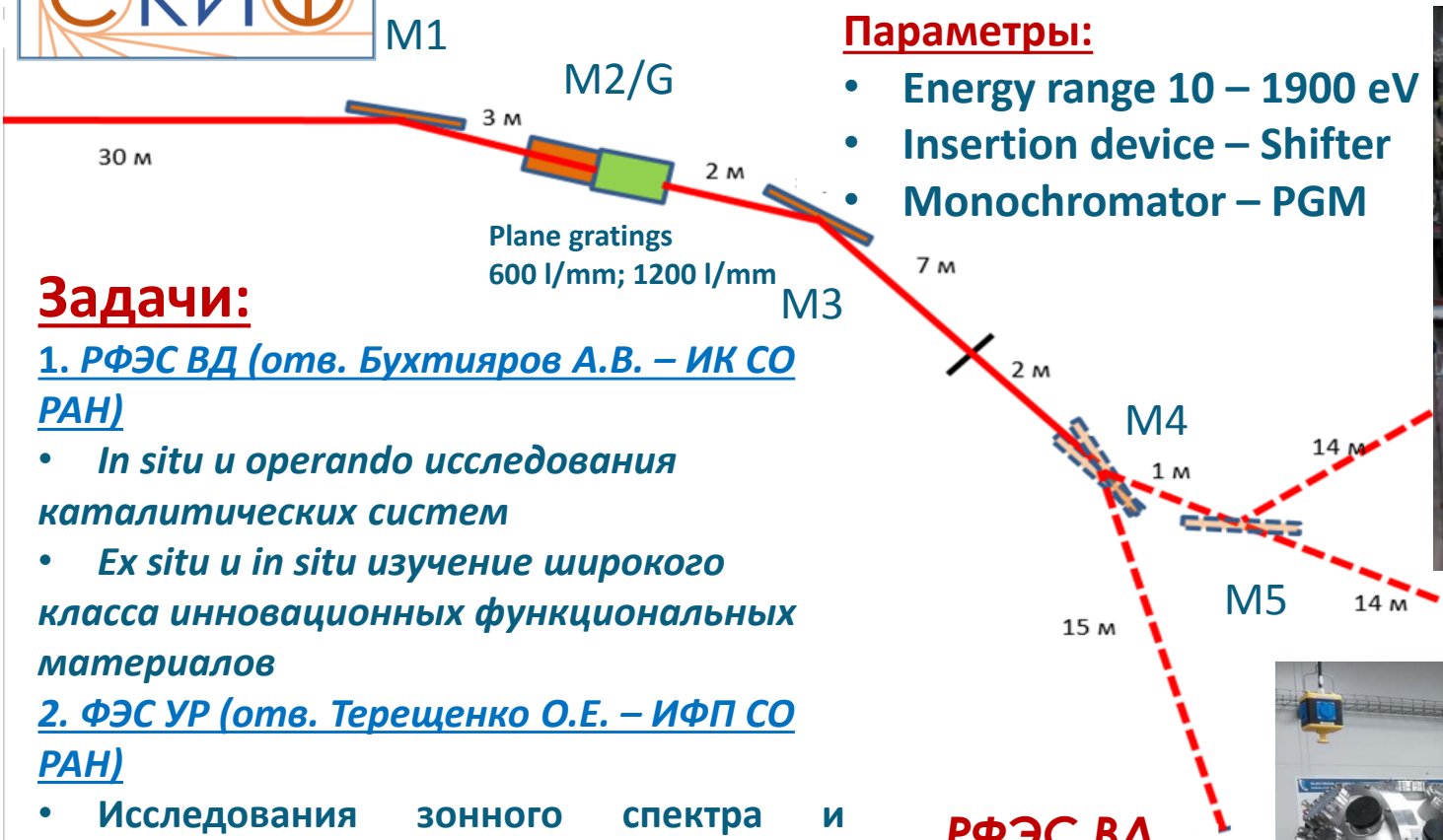
А.В. Бухтияров, А.Д. Николенко, О.Е. Терещеко



Институт катализа СО РАН
Проектный офис ЦКП «СКИФ»
avb@catalysis.ru

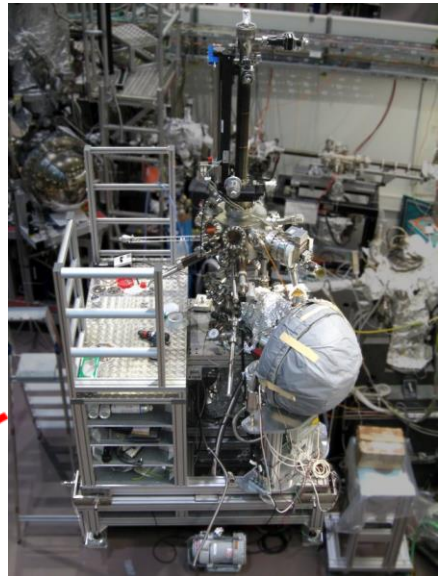
Станция 1-6: «Электронная структура»

ФЭС УР



Параметры:

- Energy range 10 – 1900 eV
- Insertion device – Shifter
- Monochromator – PGM



Задачи:

1. РФЭС ВД (отв. Бухтияров А.В. – ИК СО РАН)

- *In situ и operando исследования каталитических систем*
- *Ex situ и in situ изучение широкого класса инновационных функциональных материалов*

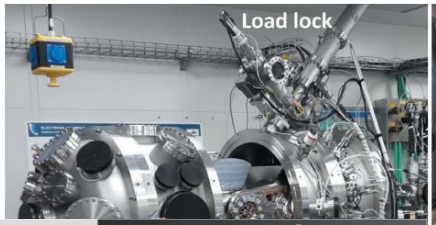
2. ФЭС УР (отв. Терещенко О.Е. – ИФП СО РАН)

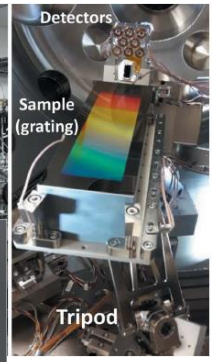
- Исследования зонного спектра и спиновой поляризации твердых тел для приложений наноэлектроники и спинтроники

3. Рефлектометрия (отв. Николенко А.Д. – ИЯФ СО РАН)

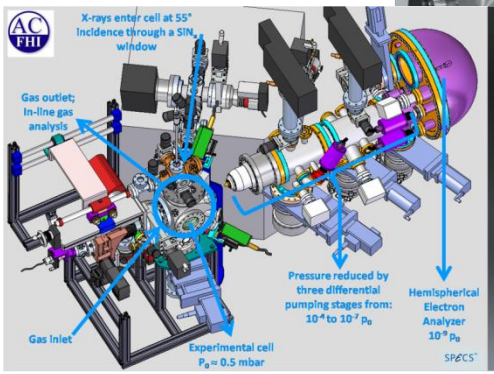
- Аттестация спектральных оптических элементов, фокусирующих элементов и детекторов рентгеновского излучения

Рефлектометрия

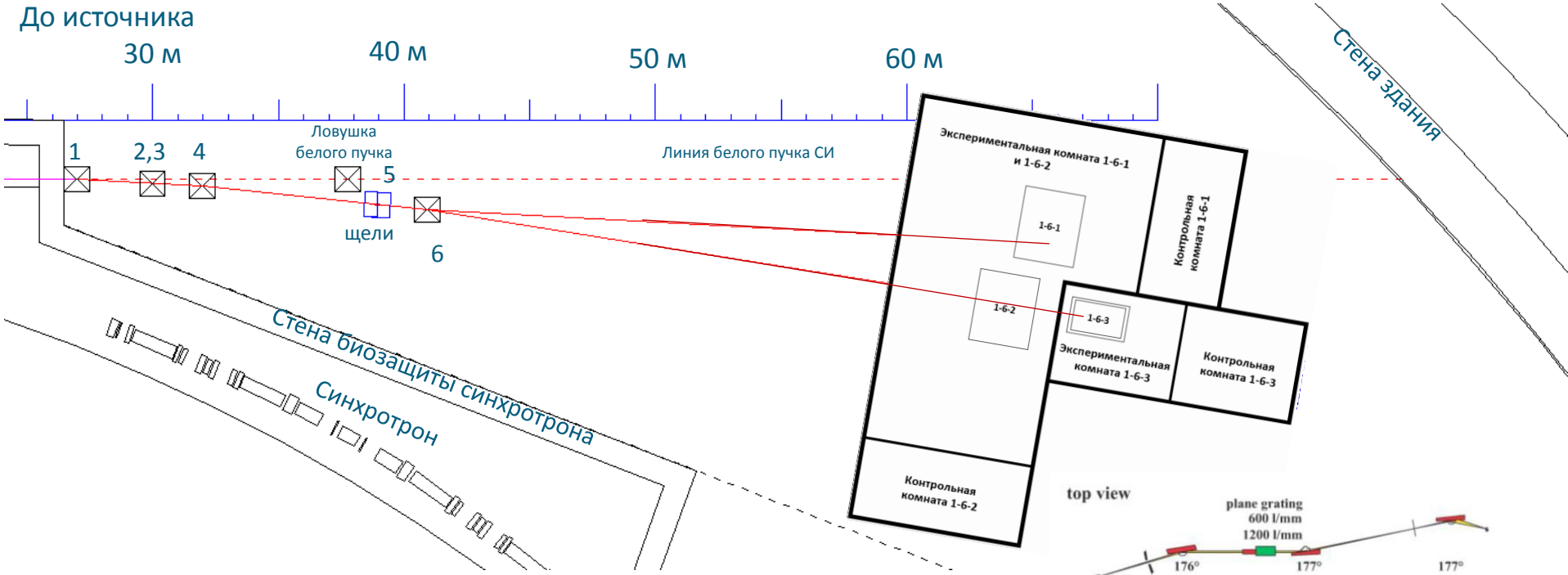


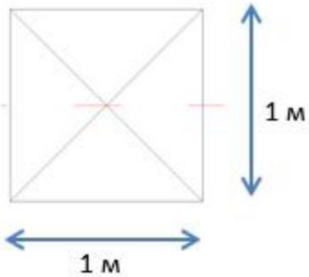


РФЭС ВД



Станция 1-6: «Электронная структура»





Условные габариты вакуумных объемов оптических элементов

Оптические элементы:

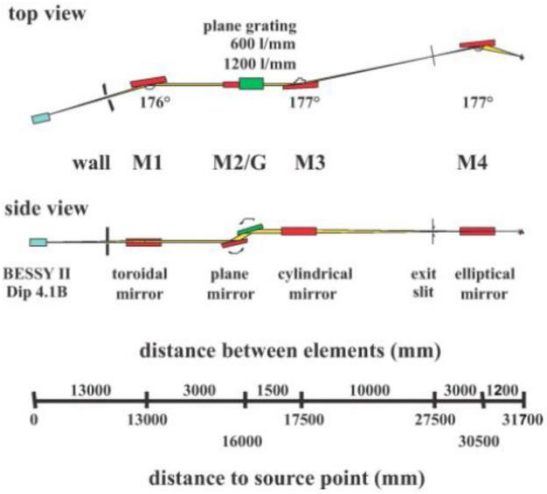
1 – Плита с узлом тороидального зеркала

2 и 3 – Монохроматор: плита, на которой расположен узел плоского зеркала и плоских дифракционных решеток

4 - Плита с узлом цилиндрического зеркала

5 – Плита с узлом щелевого механизма

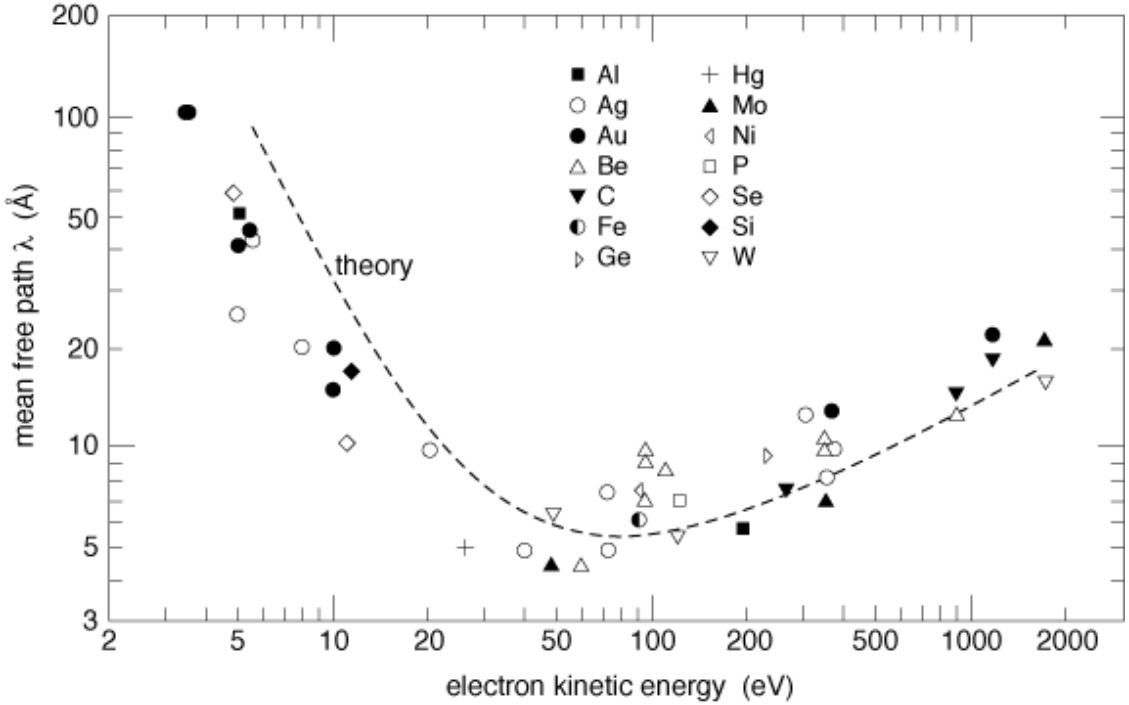
6 - Плита с узлом тороидального зеркала



Оптическая схема ISISS beamline BESSY II

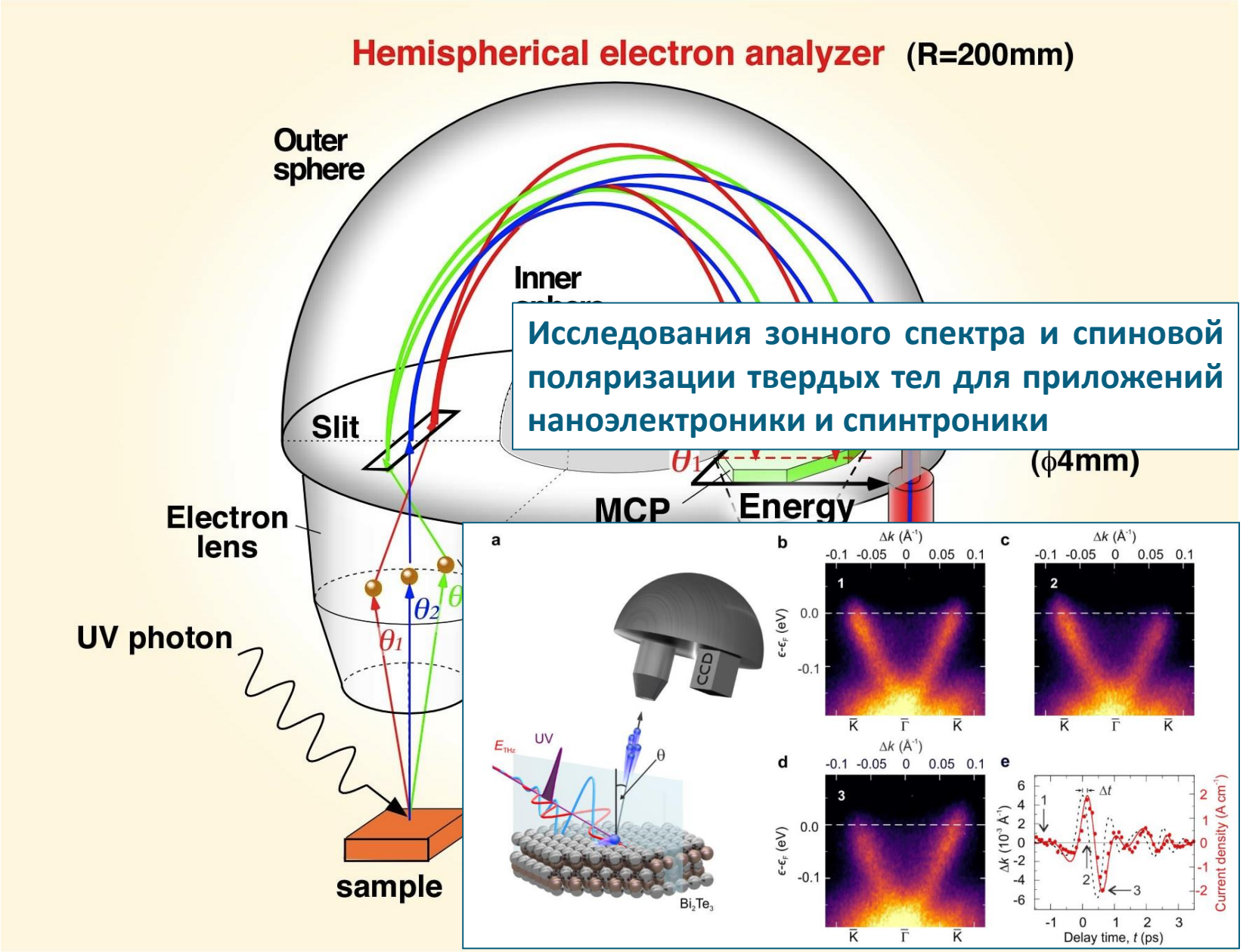
Преимущества РФЭС на базе СИ

- Использование синхротронного излучения высокой светимости позволяет возбуждать на несколько порядков большее количество фотоэлектронов, по сравнению со стандартными лабораторными источниками рентгеновского излучения (AlKα и MgKα) – увеличение интенсивности
- Малая собственную ширина излучения при использовании монохроматоров высокого разрешения – улучшение разрешения
- Возможность выбора энергии первичного возбуждения - оптимизация сечения фотоионизации, разделение перекрывающихся фотоэлектронных линий,



Изучение распределения элементов по глубине анализа при помощи изменения кинетической энергии электронов без «разрушения» поверхности

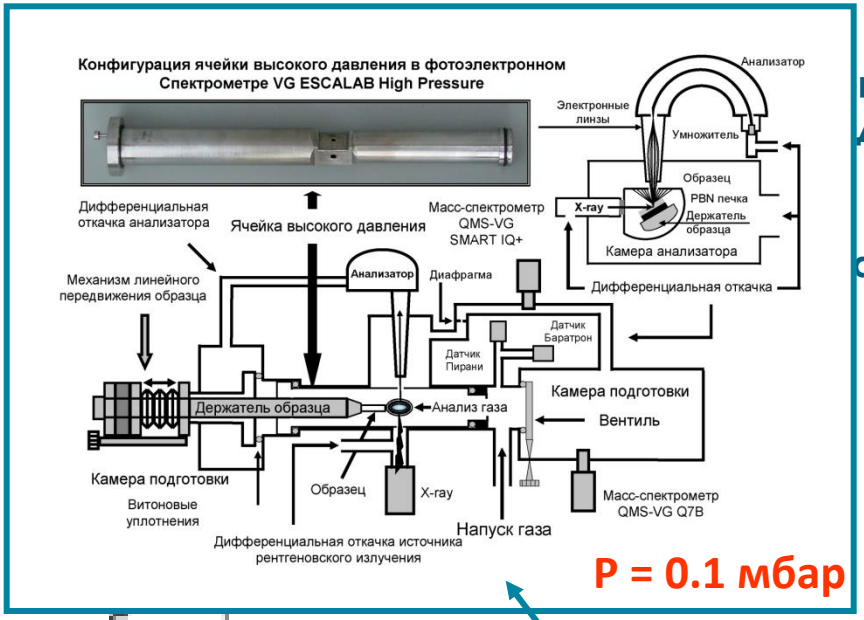
ФЭС УР с разрешением по спину

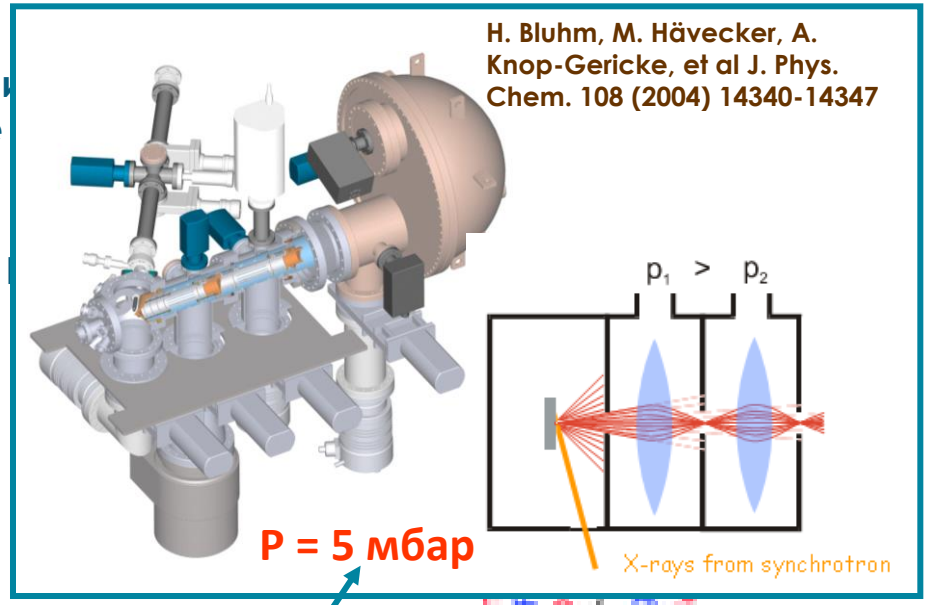


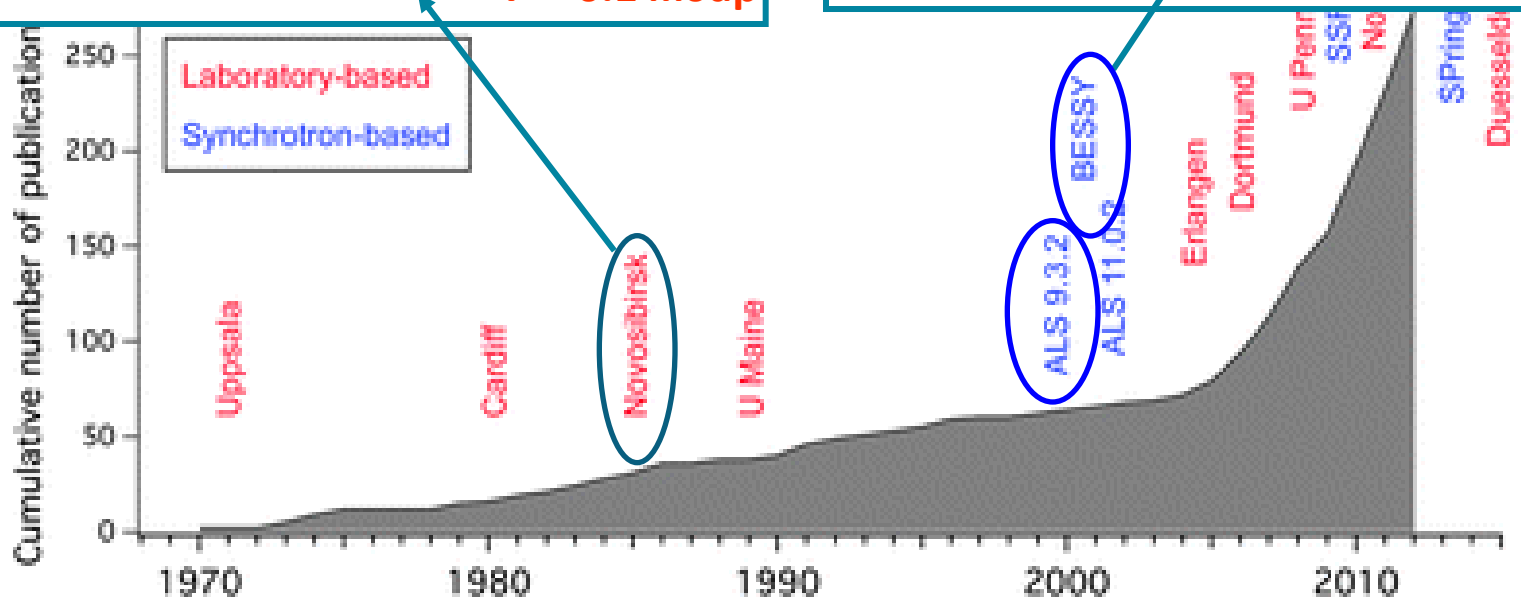
Исследования зонного спектра и спиновой поляризации твердых тел для приложений наноэлектроники и спинтроники

Nature **562**, p.396 (2018).

РФЭС при повышенном давлении







D. E. Starr, Z. Liu, M. Hävecker, A. Knop-Gericke, H. Bluhm; *Chem. Soc. Rev. 42, (2013), 5833*

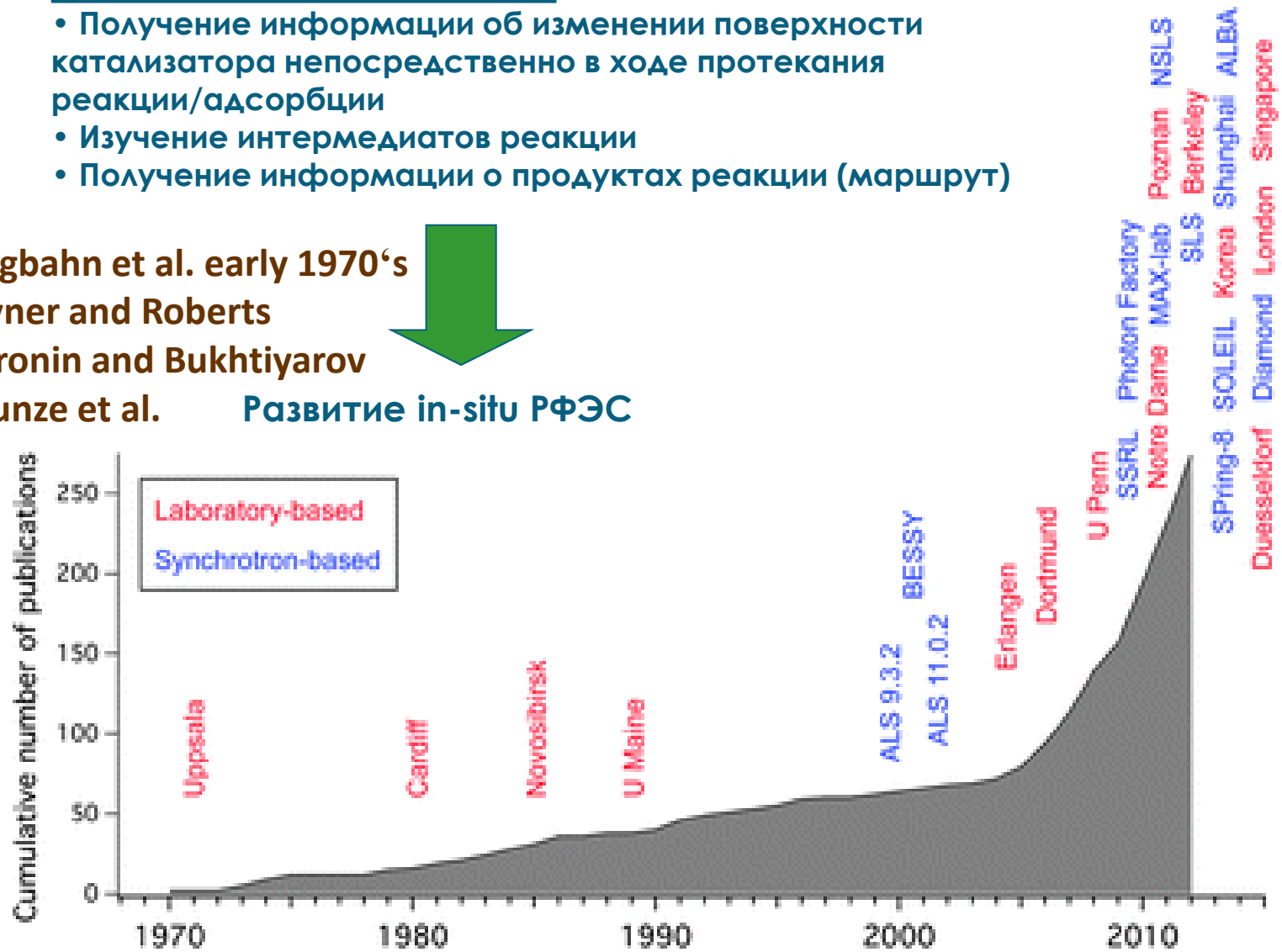
РФЭС при повышенном давлении

<u>Дополнительные возможности:</u>

- Получение информации об изменении поверхности катализатора непосредственно в ходе протекания реакции/адсорбции
- Изучение интермедиатов реакции
- Получение информации о продуктах реакции (маршрут)

Siegbahn et al. early 1970's
Joyner and Roberts
Boronin and Bukhtiyarov
Grunze et al.

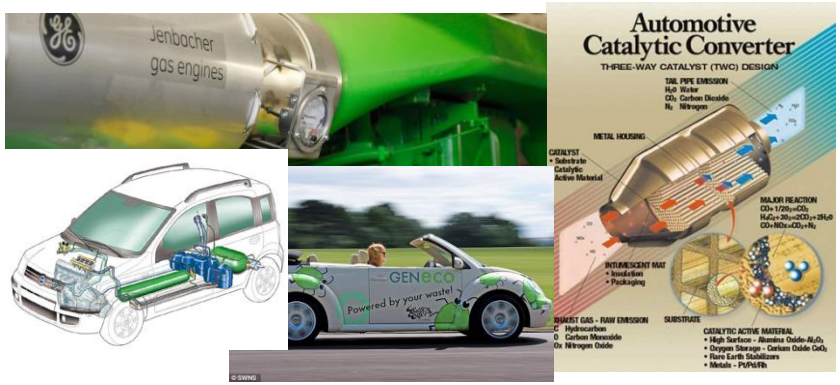
Развитие in-situ РФЭС



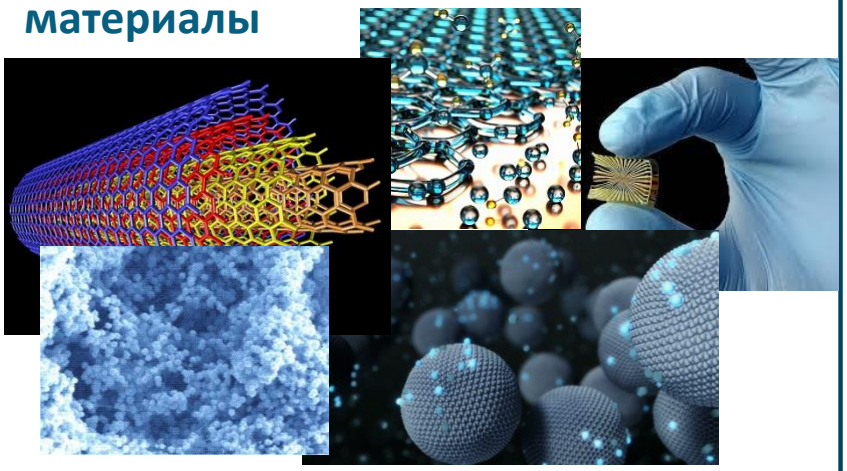
D. E. Starr, Z. Liu, M. Hävecker, A. Knop-Gericke, H. Bluhm; *Chem. Soc. Rev. 42, (2013), 5833*

Применение метода РФЭС

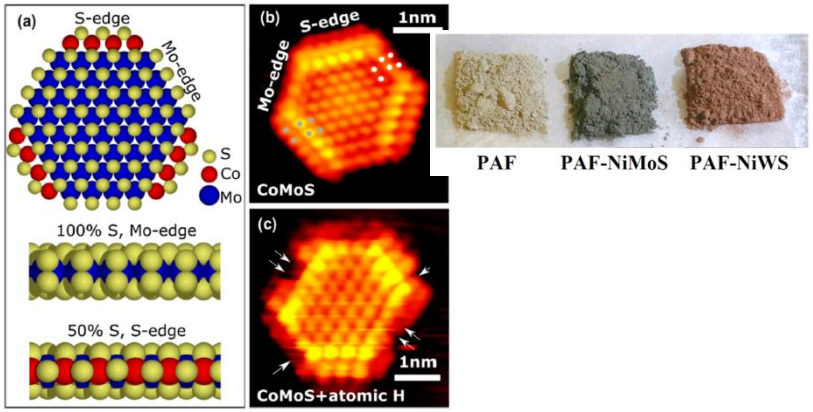
- Каталитическое восстановление оксидов азота (DeNOx)
- Полное окисление метана (Газ. двигатели)



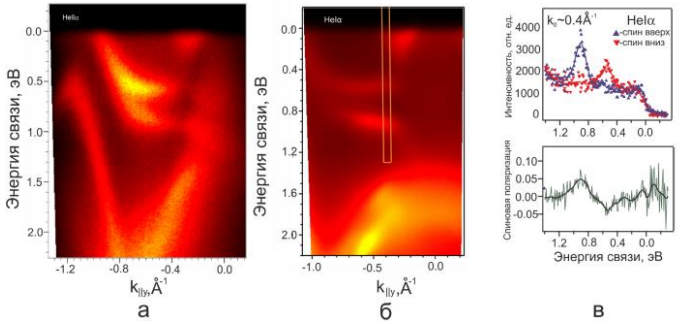
Функциональные и композитные материалы



Сульфидные катализаторы гидроочистки нефтяных фракций



Наноэлектроника и спинтроника: исследований зонного спектра и спиновой поляризации твердых тел

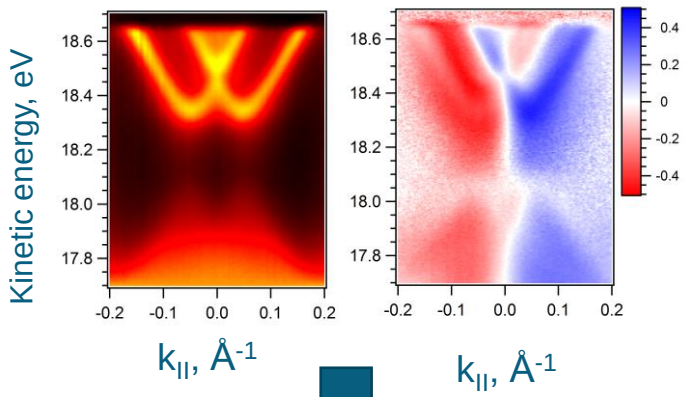


I. Формирование комбинированной электронной структуры спин-поляризованных поверхностных состояний Дирака и Рашбы

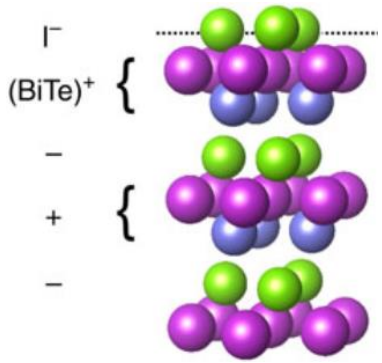
BiTeI -полупроводник (Eg=0.7 эВ) с гигантским расщеплением Рашбы

Spin-Polarized ARPES

Spin-polarized valance band spectra of initial surface

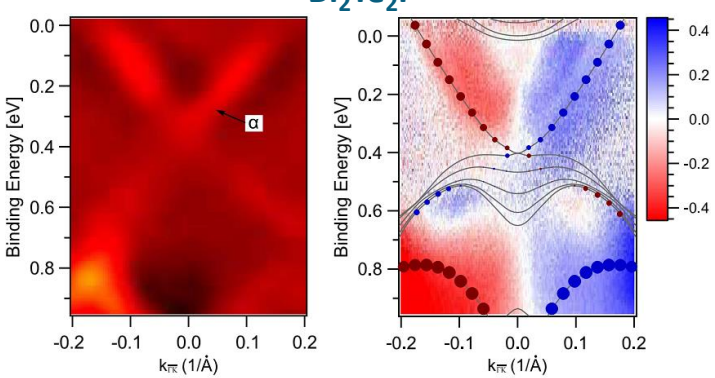


BiTeI Structure

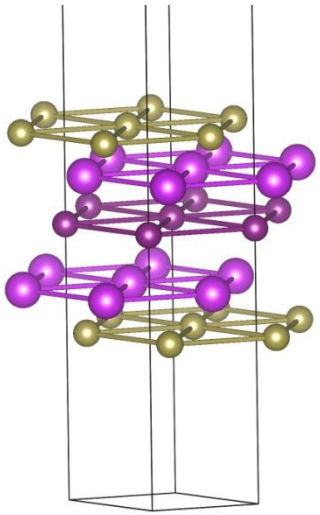


Annealing up to 230°C

Spin-polarized valance band spectra Bi_2Te_2I

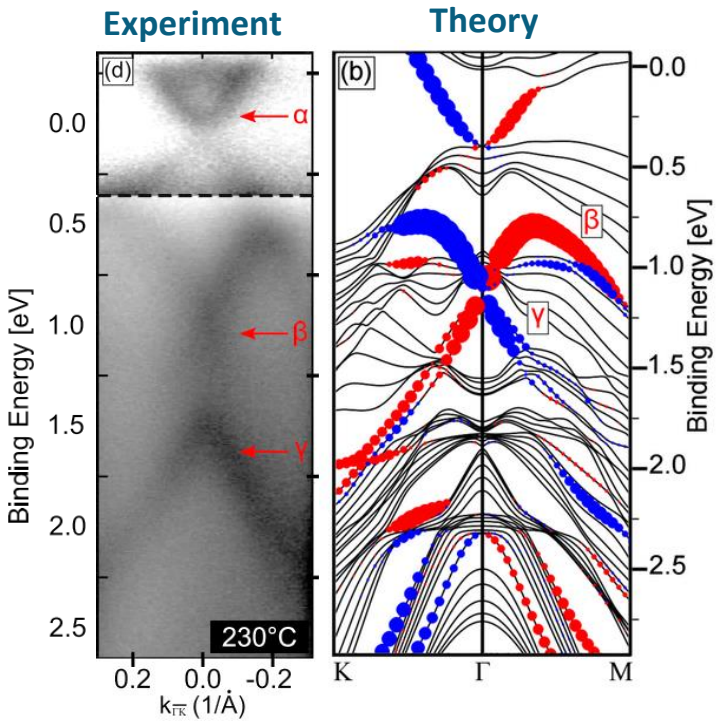


Bi_2Te_2I Structure



BESSY II

Valence band spectra after heating up to 230 C

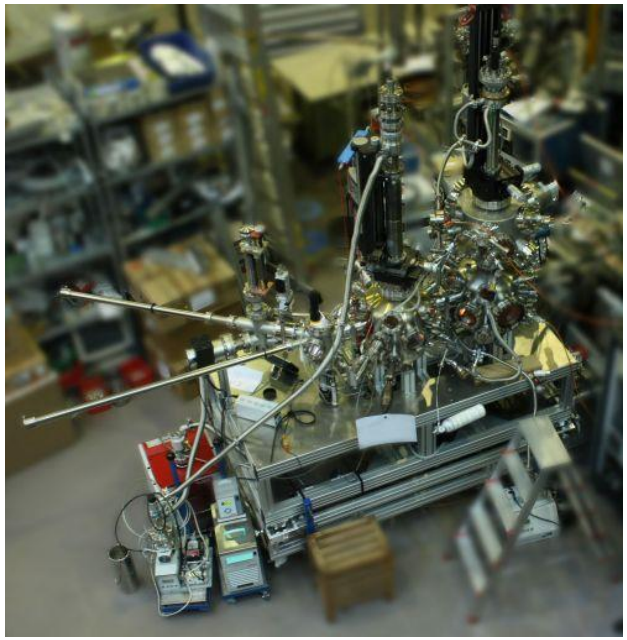


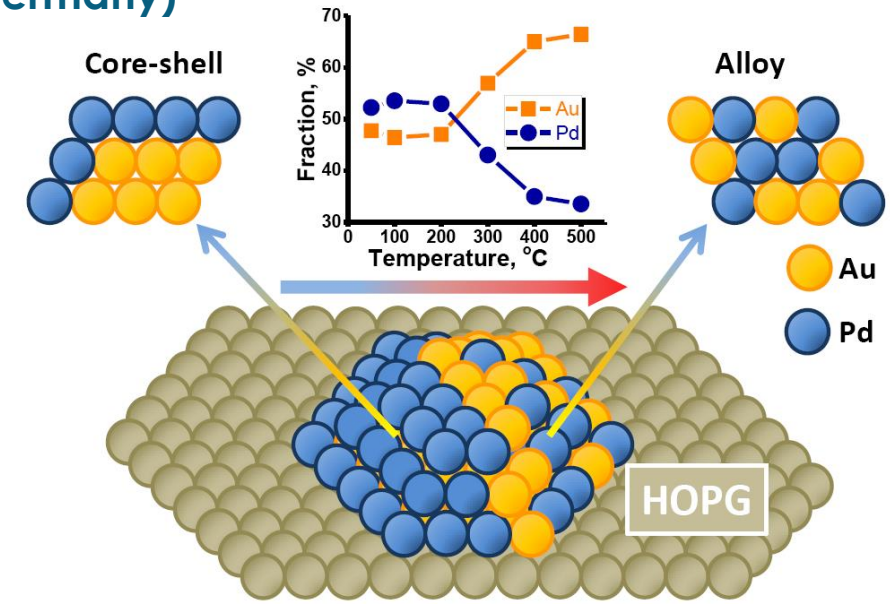
Nature Communications, 2016, v. 7, p. 11621.

S. Fiedler et al. New J. Phys. 20 (2018) 063035

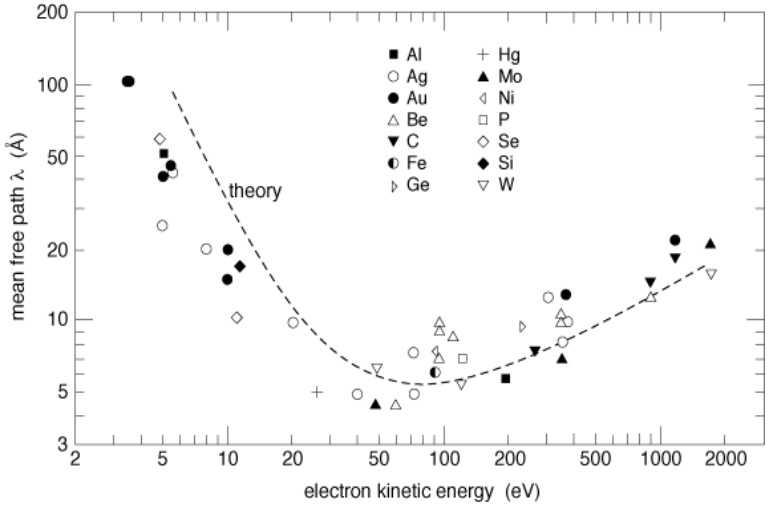
II. Модельные Pd-Au/HOPG катализаторы: методика приготовления

Russian-German Lab @ BESSY II (Berlin, Germany)





A.V. Bukhtiyarov, I.P. Prosvirin, V.I. Bukhtiyarov // Appl. Surf. Sci. 367 (2016) 214.



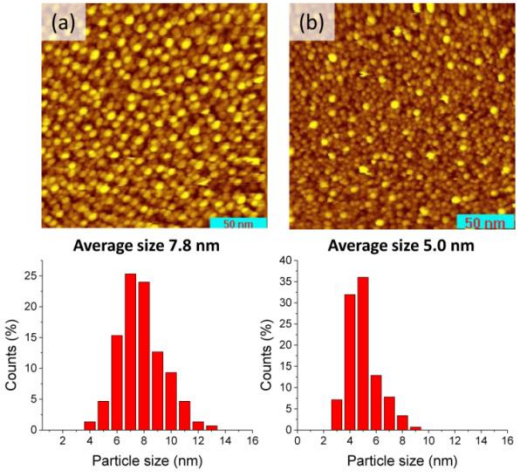
Методика приготовления

1. Мягкое травление поверхности ионами Ar^+
2. Напыление золота
3. Прогрев в UHV до 300°C
4. Напыление палладия
5. Формирование сплава

Оптимальная температура для образования сплава ~ 400°C

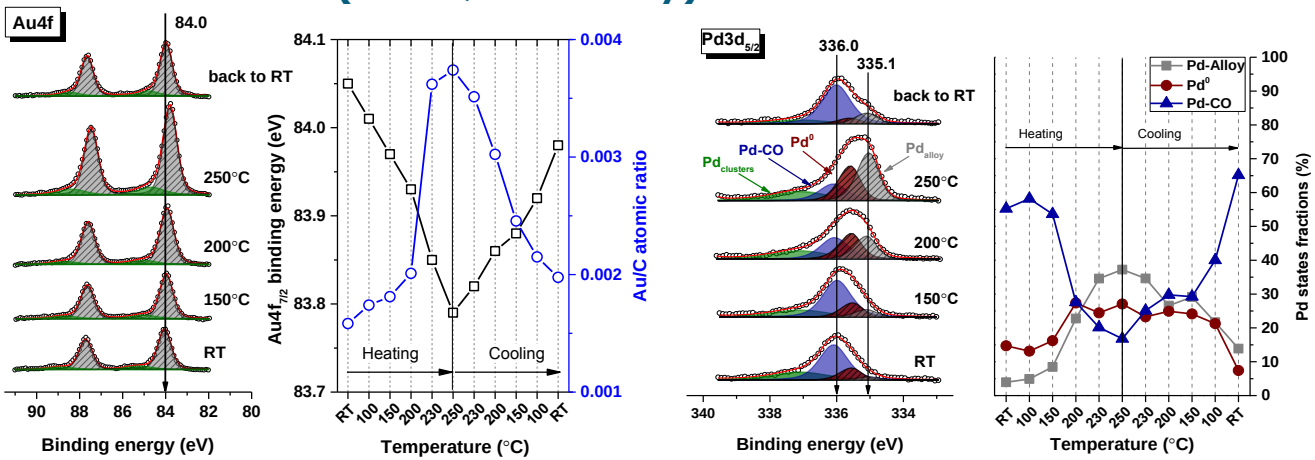
III. Окисление CO на Pd-Au/HOPG: *in situ* РФЭС и масс-спектрометрия + DFT расчёты

$PdAu_{High}$ **$PdAu_{Low}$**



Au/Pd=1.61 **Au/Pd=0.37**

ISSIS @ BESSY II (Berlin, Germany) for NAP XPS measurements



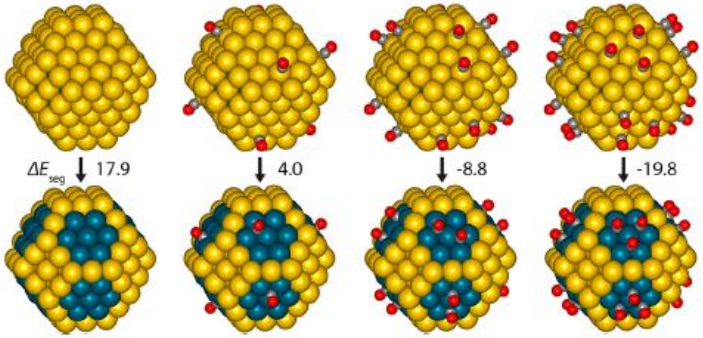
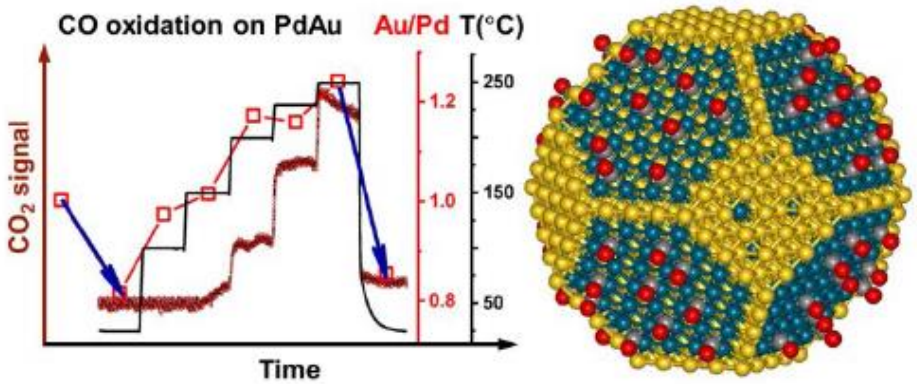


Figure 6. Structures of NP_{201} ($Pd_{56}Au_{145}$): $Pd_{in\text{-}core}$ (top row) and Pd_{terr} (bottom row) homotops with CO adsorbate on (111) terraces (0, 8, 16, and 24 CO molecules from left to right, respectively). The corresponding segregation energy, ΔE_{seg}, is given in eV.



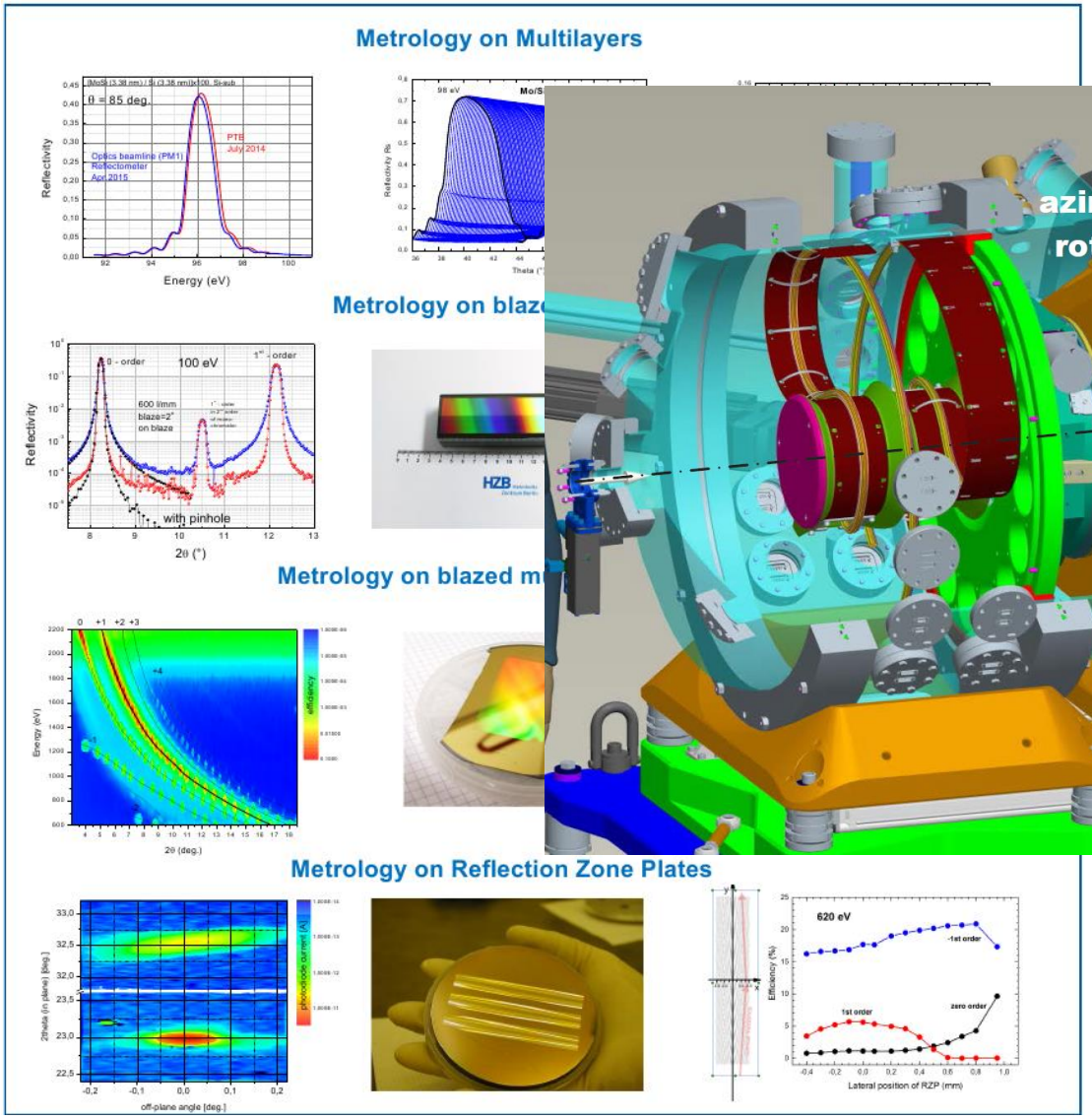
A.V. Bukhtiyarov, I.P. Prosvirin, A.A. Saraev, A.Yu. Klyushin, A. Knop-Gericke, V.I. Bukhtiyarov, Faraday Discuss., 2018, 208, 255-268.

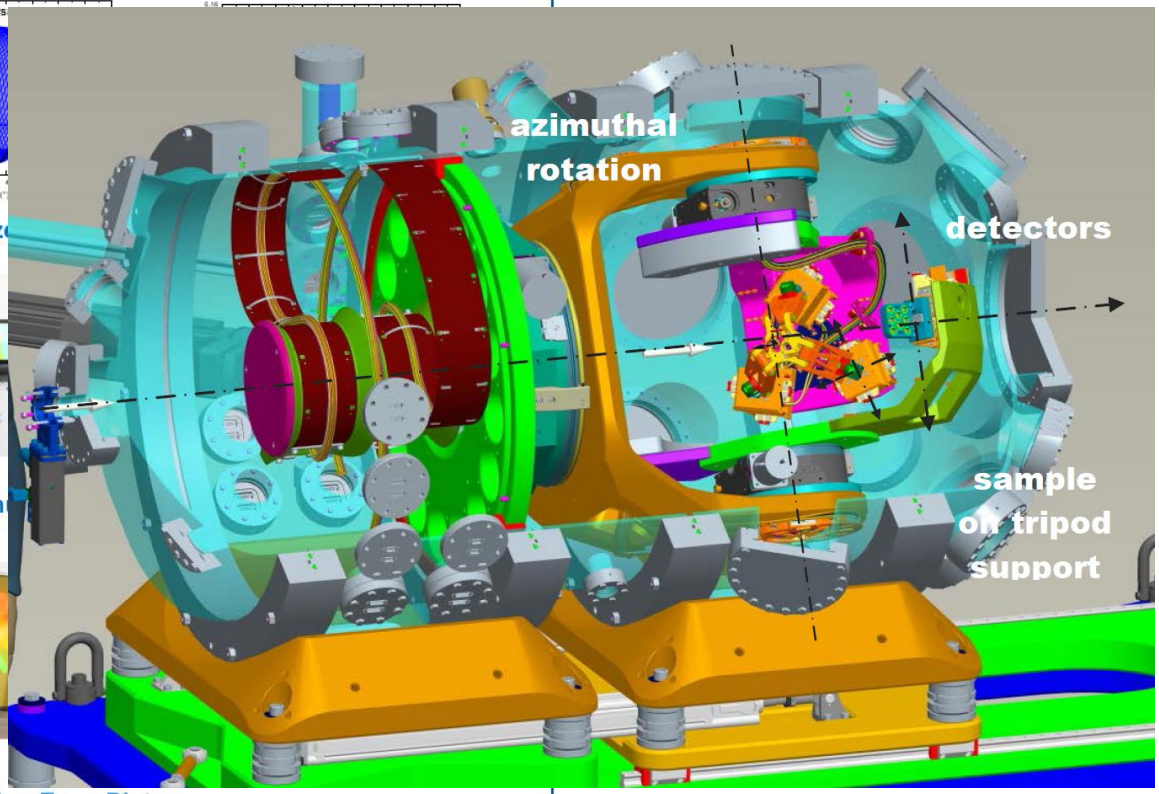
M. Mamatkulov, I.V. Yudanov, A.V. Bukhtiyarov, I.P. Prosvirin, V.I. Bukhtiyarov, and K.M. Neyman // J. Phys. Chem. C 2018, DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b07402

Мягкая рентгеновская рефлектометрия

Рефлектометрия позволяет калибровать различные оптические элементы

Reflectometry Station @ BESSY II (Berlin, Germany)



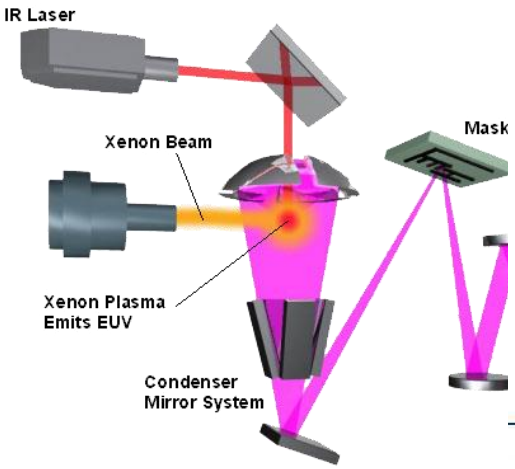


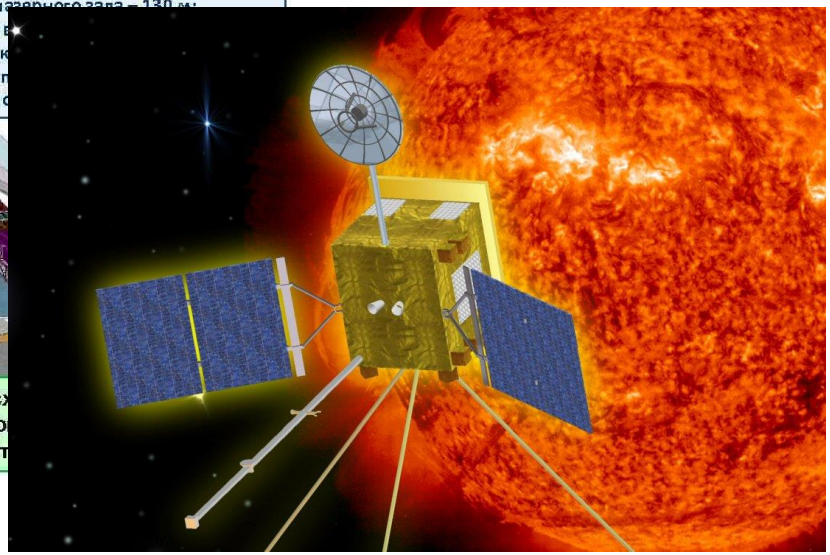
At-Wavelength Metrology Facility for UV- and XUV Reflection and Diffraction Optics F. Schäfers, F. Eggenstein, P. Bischoff at al.

Мягкая рентгеновская рефлектометрия

Разработка и реализация метрологических методик в МР диапазоне:

- Нанолитография в экстремальном УФ диапазоне
- Наблюдение высокотемпературной плазмы
- Мягкая рентгеновская и ВУФ астрономия

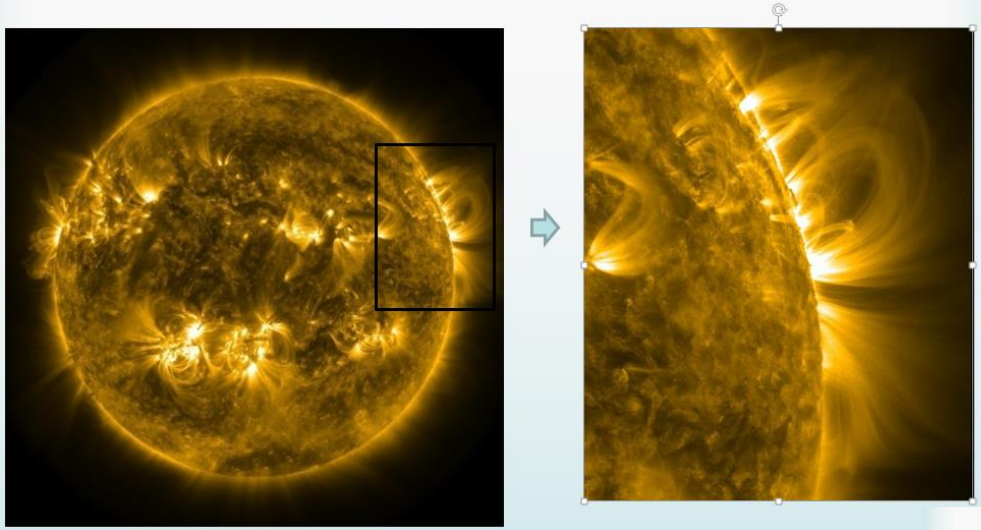




Мягкая рентгеновская рефлектометрия

изучения тонкой структуры в форме замагниченных вихрей на Солнце на краю солнечного диска

«Телескоп – лупа» (проект АРКА)



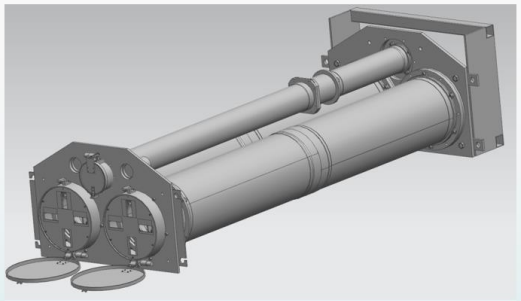
Задача проекта АРКА – получить угловое разрешение 0.10” (~ 75 км)

Работа с охлаждаемыми матрицами

Исследуемые ПЗС-матрицы фирмы Te2v:

- охлаждаемые CCD backside-illuminated
- размер 1072×2048 пикселей 13×13 мкм^2

Телескопы солнечного проекта АРКА



Три ЭУФ телескопа:

- T1, T2 – телескопы высокого разрешения (λ_1 = 171 Å, λ_2 = 304 Å, FOV = 10'×10')
- TX – обзорный телескоп с умеренным пространственным разрешением и полем зрения, захватывающим полный диск Солнца

Станция 1-6

Институт катализа СО РАН:
Квон Р.И., Просвирин И.П., Панафидин М.А., Четырин И.А., Бухтияров А.В.

Институт ядерной физики СО РАН:
Николенко А.Д.

Институт физики полупроводников СО РАН:
Терещенко О.Е.

Институт неорганической химии СО РАН:
Асанов И.П., Асанова Т.И.

Спасибо за внимание!