СОДЕРЖАНИЕ

Том 67, номер 5, 2022

Колонка главного редактора 675

Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах

М. В. Ковальчук, А. Е. Благов 677

Источник синхротронного излучения четвертого поколения с рентгеновским лазером на свободных электронах “СИЛА”: концепция ускорительно-накопительного комплекса

М. В. Ковальчук, А. Е. Благов, О. С. Нарайкин, Н. В. Марченков, Р. А. Сенин, А. В. Таргонский 726

Проект Курчатовского источника синхротронного излучения третьего поколения

В. Н. Корчуганов, А. Г. Валентинов, С. М. Полозов, А. С. Смыгачева, В. А. Ушаков, Е. А. Фомин, М. В. Ковальчук 735

Центр коллективного пользования “Сибирский кольцевой источник фотонов” (ЦКП “СКИФ”)

А. В. Бухтияров, В. И. Бухтияров, А. Н. Журавлев, К. В. Золотарев, Я. В. Зубавичус, Е. Б. Левичев, Н. А. Мезенцев, А. Д. Николенко, П. А. Пиминов, И. Н. Чуркин 742

Технологический накопительный комплекс “Зеленоград” как основа создания инжинирингового центра перспективных материалов, микроэлектроники и биомедицинских технологий

М. В. Ковальчук, О. С. Нарайкин, М. Л. Занавескин 766

Лазерно-синхротронный комплекс НИЦ “Курчатовский институт”

М. В. Ковальчук, М. М. Борисов, А. А. Гарматина, В. М. Гордиенко, А. М. Желтиков, В. В. Квардаков, В. Н. Корчуганов, И. А. Лихачёв, Е. И. Мареев, А. В. Митрофанов, М. М. Назаров, Э. М. Пашаев, Ф. В. Потёмкин, Я. О. Романовский, Е. Б. Руднева, Д. А. Сидоров-Бирюков, И. А. Субботин, М. В. Чащин, П. А. Щеглов, В. Я. Панченко 771

Исследовательский реактор ПИК. Первые эксперименты

М. В. Ковальчук, В. В. Воронин, С. В. Гаврилов, А. В. Гартвик, М. В. Дьячков, Д. А. Ипатов, В. А. Матвеев, В. В. Тарнавич, В. А. Ульянов 785

Импульсный нейтронный источник на основе испарительно-скалывающей реакции на базе протонного синхротрона У-1.5

М. В. Ковальчук, Н. Е. Тюрин, С. В. Иванов, А. П. Солдатов 795

Распределенный центр ядерной медицины НИЦ “Курчатовский институт”: история, современное состояние и перспективы развития

М. В. Ковальчук, О. С. Нарайкин, К. А. Сергунова, Ю. А. Дьякова, А. Н. Черных, Р. А. Алиев, В. И. Максимов, С. В. Иванов, Н. Е. Тюрин, А. П. Солдатов, Г. И. Кленов, В. С. Хорошков 801

Интеграция естественно-научного и гуманитарного знания в историческом материаловедении

Е. Б. Яцишина, М. В. Ковальчук 818

Самоорганизация белковых молекул при формировании кристаллов и пленок

Ю. А. Дьякова, М. В. Ковальчук 831

Разделение механизмов фотоиндуцированных деформаций в кристаллах с помощью времяразрешающей рентгеновской дифрактометрии

Ф. С. Пиляк, А. Г. Куликов, Ю. В. Писаревский, А. Е. Благов, М. В. Ковальчук 850

EDN: GDZXCL
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 675–676

КОЛОНКА ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА

DOI: 10.31857/S0023476122050046

Номер посвящен 75-летию президента
Национального исследовательского центра
«Курчатовский институт»
Михаила Валентиновича Ковальчука

Мегаустановки в современном научном мире – свидетельство научного потенциала, конкурентоспособности страны – базовый элемент технологической независимости и национальной безопасности. Достижения в создании и использовании крупных исследовательских установок (ускорительно-накопительные комплексы, нейтронные и синхротронные источники, лазеры на свободных электронах и т.д.) – яркие страницы в истории мировой и отечественной науки.

С 2017 г. в немецком городе Гамбург успешно работает крупнейшая международная установка для структурных исследований класса мегасайенс – Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах. Установка создана на основе идей российских ученых при ключевом участии России в проекте и на сегодня представляет собой самый яркий на земле источник когерентного рентгеновского излучения, открывающий принципиально новые горизонты для рентгеновской структурной диагностики – исследования атомной структуры и фемтосекундной динамики широчайшего класса объектов: биоорганических, органических и неорганических, упорядоченных и неупорядоченных, макроскопических и наноразмерных, в том числе одиночных молекул и атомов.

В Российской Федерации в настоящее время в соответствии с указом президента Российской Федерации реализуется масштабная Федеральная научно-техническая программа, направленная на формирование принципиально нового ландшафта мегасайенс инфраструктуры – “Программа развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы” (Программа). В ее рамках предусмотрено создание национальной сети научных центров синхротронных и нейтронных исследований и распределенного научно-образовательного центра ядерной медицины.

Флагманский проект Программы – источник синхротронного излучения четвертого поколения с лазером на свободных электронах “СИЛА” с периметром более 1100 м и энергией электронов 6 ГэВ – будет построен в г. Протвино Московской области. Создание нового синхротронно-лазерного источника с уникальными характеристиками генерируемого излучения откроет новые просторы для научных исследований и физических экспериментов. Широчайшие исследовательские возможности и мультидисциплинарный характер экспериментов в сочетании с полным спектром прикладных задач обеспечат получение новых результатов, опережающих мировой уровень, – основы создания новых прорывных технологий – базиса развития Российской экономики XXI века.

Центр нейтронных исследований на базе высокопоточного реактора ПИК, создаваемый в г. Гатчина, уже приступил к первым тестовым экспериментам: в 2021 г. введено пять первых экспериментальных станций, выведен на плановые мощности реакторный комплекс. Следующим этапом планируется создание еще 20 исследовательских инструментов.

В качестве пилотных проектов источников синхротронного излучения четвертого поколения и безреакторных источников нейтронов на основе реакции испарительно-скалывающего типа будут реализованы проекты специализированного синхротронного источника “СКИФ” в наукограде Кольцово в Новосибирской области и источника нейтронов для структурных исследований “ОМЕГА” в г. Протвино на базе действующего протонного ускорительного комплекса У-70.

Программой также предусмотрена модернизация ускорительно-накопительного комплекса источника синхротронного излучения “КИСИ-Курчатов” в Москве – единственного действующего в России специализированного синхротрона, который уже прошел несколько стадий модернизации и в настоящее время оснащен уникальным исследовательским оборудованием. На сегодняшний день на “КИСИ-Курчатов” работает 16 экспериментальных исследовательских станций разной направленности. Идет модернизация существующих экспериментальных линий и вводятся в эксплуатацию новые станции. На “КИСИ-Курчатов” ежегодно проводятся сотни экспериментов исследовательскими группами российских и

зарубежных организаций. Модернизация ускорительного-накопительного комплекса завершит новый облик ключевого в московском регионе специализированного синхротрона. Опыт, приобретенный в результате 20-летней эксплуатации Курчатовского синхротрона, будет применен при создании схожего с ним по конфигурации и научным задачам источника синхротронного излучения "РИФ" в Дальневосточном регионе на о. Русский, который будет построен в кампусе Дальневосточного федерального университета в результате реализации Программы.

Также в рамках Программы будут завершены работы по модернизации инженерных систем, экспериментальной инфраструктуры и вводу в эксплуатацию источника синхротронного излучения в г. Зеленоград (технологический накопительный комплекс – ТНК "Зеленоград"). ТНК "Зеленоград" создавался как основной исследовательско-технологический элемент предприятий микроэлектронной промышленности в г. Зеленоград, что нашло отражение в ряде технических решений, не имеющих аналогов и сегодня. В проекте ТНК "Зеленоград" впервые в мире было предусмотрено сопряжение работ аналитических синхротронных станций с технологическими станциями и линиями для выпуска партий специализированных интегральных схем. Высокая степень готовности ТНК "Зеленоград" позволяет в кратчайшие сроки сформировать на базе ТНК "Зеленоград" научно-производственный и научно-образовательный комплекс, решающий задачу освоения серийного производства и подготовки кадров в самых передовых областях техники и технологий.

Одним из важнейших, пожалуй, следствий освоения атома стала ядерная медицина. Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт" сыграл основополагающую роль в создании и развитии ядерной медицины в России. В рамках Программы под научным руководством Курчатовского института сформулирована новая концепция развития медицинских ядерных и ускорительных технологий, результатом реализации которой станет создание в нашей стране распределённого центра ядерной медицины. Центр ядерной медицины будет включать в себя клинические комплексы протонной и ионной углеродной лучевой терапии на базе синхротронов в Москве и Протвино, онкоофтальмологический комплекс на базе циклотрона в Гатчине, радиоизотопный комплекс в Москве и Гатчине. В сотрудничестве с ведущими научными, образовательными и медицинскими организациями будет проводиться не только разработка, но и клиническая апробация и отработка современных методов диагностики и лечения пациентов, основанных на применении ядерных технологий и, что особенно важно — соответствующего отечественного оборудования.

Создаваемые установки – ключевые элементы обеспечения опережающего развития отечественной науки по всем приоритетным направлениям, сохранения лидирующих позиций России в области синхротронных исследований, ускорительных технологий и ядерной медицины на многие десятилетия вперед – центры притяжения ведущих ученых и талантливой молодежи, формирования принципиально нового научного ландшафта, направленного на получение прорывных результатов мирового уровня.

В данный тематический выпуск включены статьи и обзоры с описанием научной программы, основных характеристик и экспериментальных возможностей действующего Европейского лазера на свободных электронах и создаваемых в Российской Федерации источников синхротронного излучения, нейтронов и центра ядерной медицины. Публикация данного выпуска представляется необходимой для понимания научных задач и ближайших перспектив развития синхротронных и нейтронных исследований, ускорительных технологий и ядерной медицины в нашей стране.

Главный редактор, член-корреспондент РАН

профессор М.В. Ковальчук

EDN: ZUZOFG
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 677–725

УДК 535-34, УДК 548.73

ЕВРОПЕЙСКИЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ ЛАЗЕР НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

© 2022 г. М. В. Ковальчук[1], А. Е. Благов[1,*]

[1] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия*

**E-mail: blagov@crys.ras.ru*

Поступила в редакцию 17.02.2022 г.
После доработки 17.02.2022 г.
Принята к публикации 11.03.2022 г.

Обзор посвящен открытию Европейского рентгеновского лазера на свободных электронах – European X-ray Free Electron Laser (XFEL). Кратко описаны история создания и принципы работы классических лазеров и лазеров на свободных электронах длинноволнового и коротковолнового диапазона. Особое внимание уделено участию России в создании проекта XFEL, описанию исследовательских станций и научных инструментов, обсуждаются их экспериментальные возможности и результаты первых экспериментов, полученные на новой мегаустановке. Рассмотрены перспективы актуальных научных направлений, открывающиеся в связи с созданием одного из самых амбициозных научных проектов – самого яркого в мире источника света – Европейского рентгеновского лазера на свободных электронах.

DOI: 10.31857/S002347612205006X

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение

1. Лазер и принципы генерации лазерного излучения

2. Лазеры на свободных электронах

3. Лазеры на свободных электронах коротковолнового диапазона

4. Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах

5. Исследовательские станции и инструменты

5.1. Станция "Фемтосекундные рентгеновские эксперименты" (Femtosecond X-ray Experiments, FXE)

5.2. Станция "Биомолекулы, одиночные частицы, кластеры и последовательная фемтосекундная кристаллография" (Single Particles, clusters, and Biomolecules and Serial Femtosecond X-ray crystallography, SPB/SFX)

5.3. Станция "Визуализация и динамика материалов" (Materials imaging and dynamics, MID)

5.4. Станция "Материя с высокой плотностью энергии" (High-Energy Density matter, HED)

5.5. Станция "Спектроскопия и когерентное рассеяние" (Spectroscopy and Coherent Scattering, SCS)

5.6. Станция "Малые квантовые системы" (Small Quantum Systems, SQS)

Заключение

ВВЕДЕНИЕ

Значительный прогресс в научно-технической сфере в середине XX века стал возможным благодаря изобретению оптического лазера, генерирующего яркое когерентное излучение. Создать подобное для рентгеновских лучей являлось давней мечтой многих ученых. В настоящее время эта мечта претворяется в жизнь в связи с успешным строительством и развитием по всему миру рентгеновских лазеров на свободных электронах (**РЛСЭ**) [1].

Излучение лазеров на свободных электронах по яркости, пространственной когерентности и временному разрешению на несколько порядков превосходит эти характеристики для самых мощных на сегодня синхротронов, что позволяет расценивать рентгеновский лазер как принципиально новый инструмент для исследований (рис. 1). Сверхъяркие и когерентные пучки фотонов РЛСЭ позволяют заглянуть в совершенно новую область пространства и времени, открывают невиданные возможности для изучения структурной динамики твердого тела, жидкостей и газов на атомном уровне со сверхвысоким (фемтосекундным) разрешением по времени.

1. ЛАЗЕР И ПРИНЦИПЫ ГЕНЕРАЦИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Первого сентября 2017 г. в пригороде немецкого города Гамбург Шенефельде был торжествен-

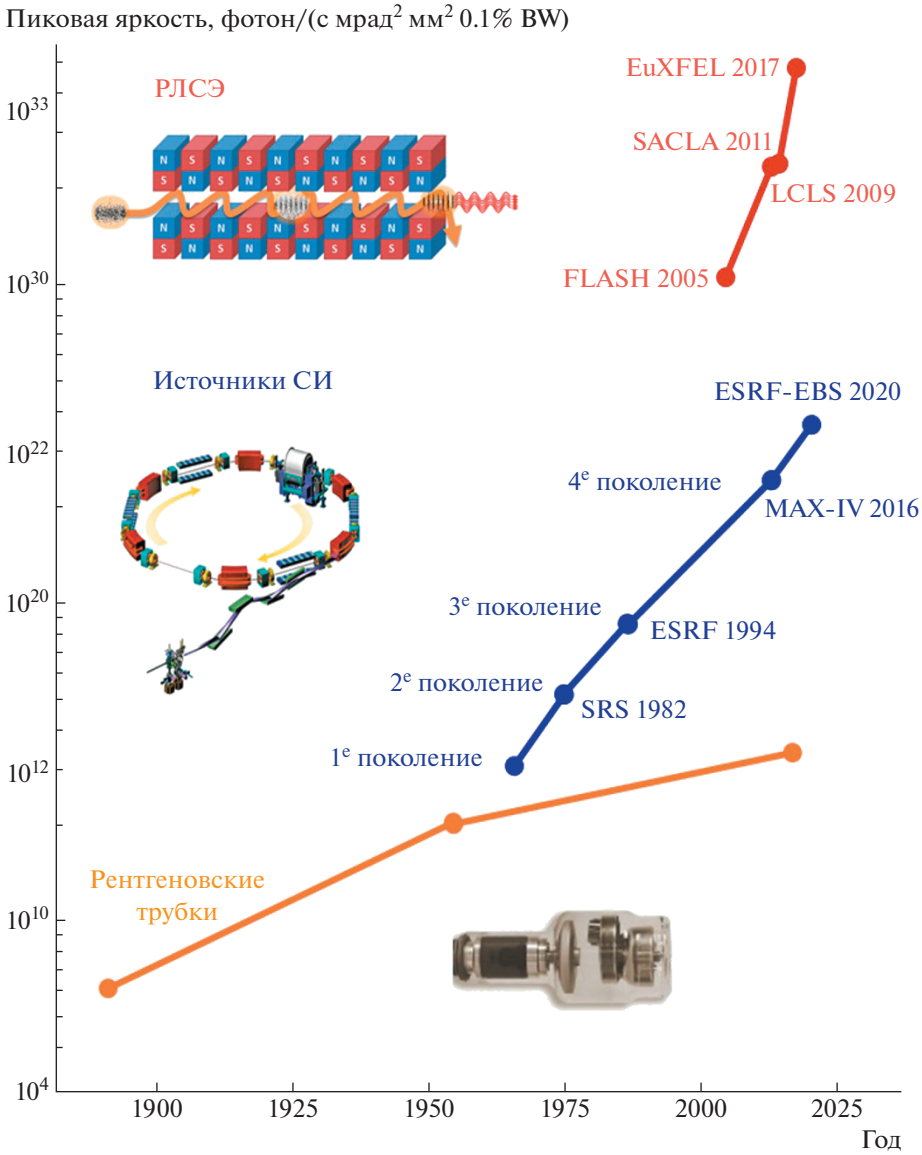


Рис. 1. Развитие источников рентгеновского и синхротронного излучения.

но открыт Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах (European X-ray Free Electron Laser, **XFEL**). На сегодня это самый большой рентгеновский лазер в мире – длина только ускорительной части составляет около 2 км, а суммарная длина этой мегаустановки – 3.5 км.

Что же такое лазер на свободных электронах и почему он имеет такие размеры, какими характеристиками он обладает и чем отличается от обычного лазера? Лазер (LASER) – это английская аббревиатура от Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation – усиление света за счет вынужденного излучения. Классический лазер, или квантовый генератор, представляет собой прибор, создающий узконаправленный поток когерентного монохроматического электромагнитного излучения. Принцип работы классического лазера основан на квантовом эффекте – явлении вынужденного или индуцированного излучения, впервые предсказанного А. Эйнштейном в 1916 г. [2].

Гипотеза, выдвинутая Эйнштейном, в частности, предполагает, что под действием электромагнитного излучения атом или молекула, находящаяся в возбужденном состоянии, может перейти в более низкое энергетическое состояние с испусканием электромагнитного излучения той же частоты. Это и есть вынужденное (индуцированное) излучение. Другими словами, налетающий фотон запускает переход среды из возбужденного состояния в более выгодное низкоэнергетическое состояние, который сопровождается рождением

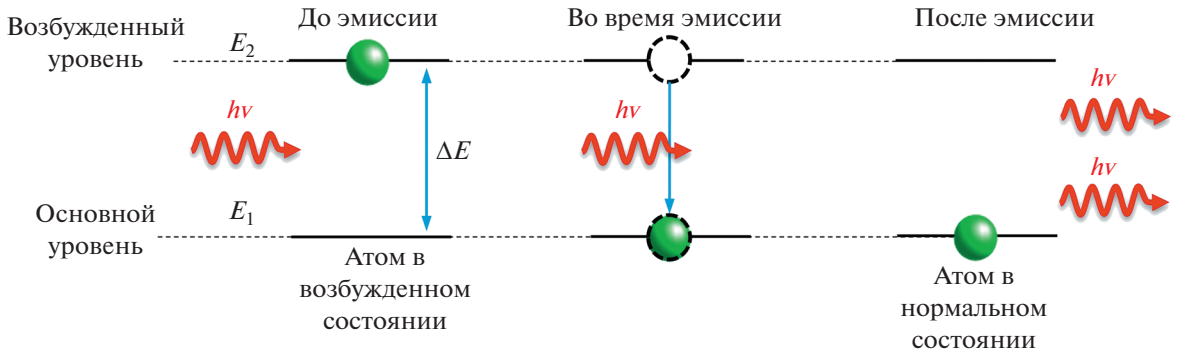


Рис. 2. Вынужденное излучение, индуцированное налетающим фотоном.

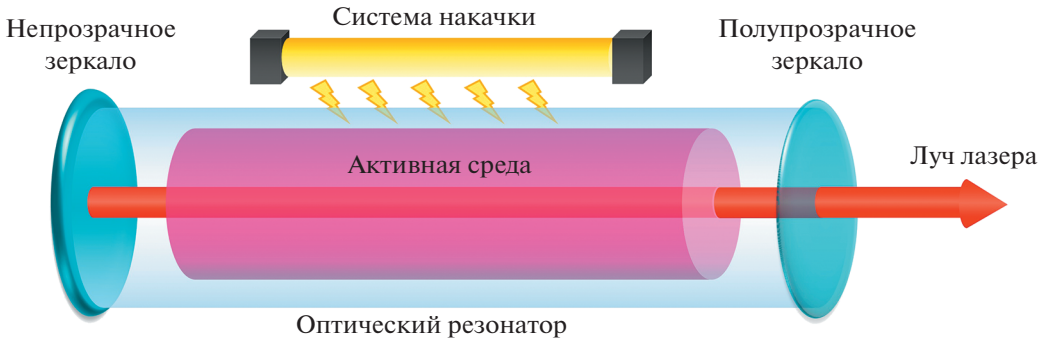


Рис. 3. Классическая схема оптического лазера.

еще одного точно такого же фотона с той же энергией и направлением распространения, при этом сам фотон не поглощается (рис. 2).

Советский физик В. Фабрикант в 1938 г. впервые обратил внимание на принципиальную возможность создания среды с отрицательной абсорбцией, т.е. среды усиливающей, а не ослабляющей проходящее через нее излучение. В своей докторской диссертации он писал: "... в направлении падающего пучка благодаря направленности актов отрицательной абсорбции должно наблюдаться увеличение интенсивности. За счет отрицательной абсорбции произойдет перераспределение излучения по углам" [3]. То есть если создать условия, когда в среде преобладает вынужденное излучение – число возбужденных атомов превышает число невозбужденных, такая среда будет обладать отрицательным поглощением (абсорбцией) и будет усиливать проходящее излучение. Это состояние среды называется инверсной заселенностью уровней. Для его создания используются различные системы накачки: оптические, химические, электрические и др.

По сути, В. Фабрикант предсказал возможность создания принципиально нового электромагнитного излучателя (впоследствии названного лазером). Но почти два десятилетия потребовалось ученым для того, чтобы применить его идеи на практике.

Первые работы, в которых описан квантовый генератор, были выполнены советскими учеными Н. Басовым и А. Прохоровым в 1954 г. [4]. Была разработана теория и предложены устройства усиления радиоизлучения. Независимо американскими физиками Д. Гордоном, Ч. Таунсом и Х. Цайгером было сделано сообщение об испытаниях нового прибора – квантового усилителя, работающего в области микроволнового излучения на частоте энергетических переходов молекул аммиака – 24 ГГц, который получил название мазер (MASER, Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) [5].

Работу первого квантового генератора в оптическом диапазоне продемонстрировал в 1960 г. американский ученый Т. Мейман [6]. Он применил кристалл рубина (Al_2O_3) с незначительной примесью хрома (Cr) в качестве активной среды и резонатор Фабри–Перо вместо объемного резонатора, используемого в мазере (рис. 3).

Генерация лазерного излучения для более коротких волн ультрафиолетового и рентгеновского диапазона существенно затруднена по сравнению с оптическим диапазоном: эффективность лазерного излучения сильно уменьшается в области

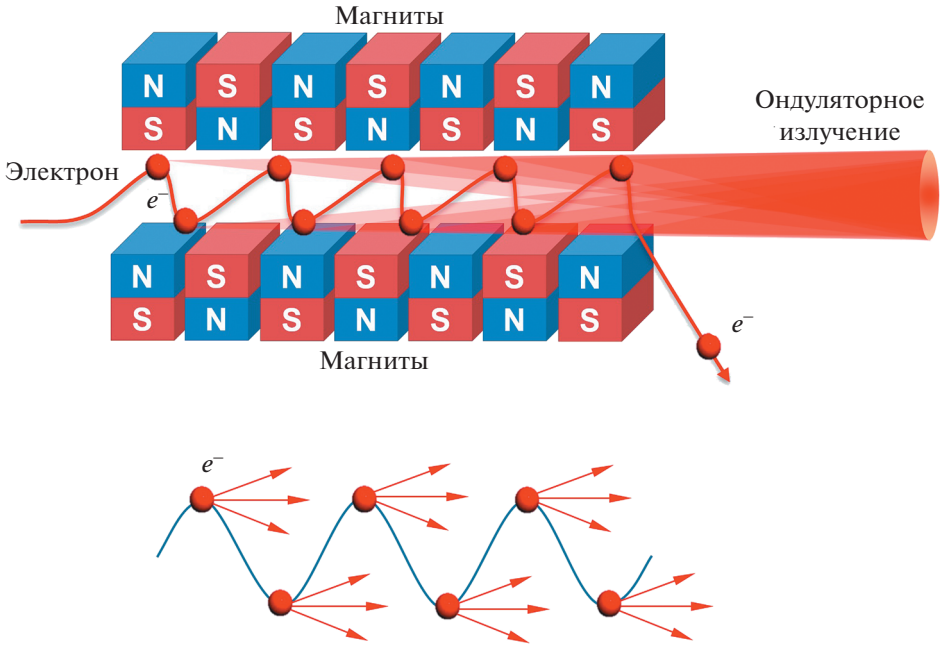


Рис. 4. Ондулятор и излучение электрона, двигающегося по периодической траектории.

малых длин волн, и в связи с ростом вероятности спонтанного излучения требуются существенно бóльшие мощности накачки. Кроме того, в рентгеновском диапазоне очень сложно реализовать резонатор, аналогичный оптическому. В настоящее время наименьшая длина волны, для которой реализована лазерная генерация в классической схеме, составляет несколько десятков нанометров [7].

2. ЛАЗЕРЫ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

Одна из немногих альтернатив классической схемы лазера – лазер на свободных электронах (**ЛСЭ**). Основу работы ЛСЭ (т.е. не связанных с ядром) составляют принципы генерации синхротронного, или магнитотормозного, излучения (**СИ**) – излучения электрона, двигающегося по криволинейной траектории в магнитном поле, вектор магнитной индукции которого перпендикулярен направлению движения электрона. Излучение ЛСЭ представляет собой согласованное излучение электронов, совершающих периодические (слаломные) колебания под действием периодического знакопеременного магнитного поля, созданного системой магнитов.

Отличительной особенностью ЛСЭ по сравнению с классическим лазером является возможность изменения длины волны излучения в широких пределах (начиная от СВЧ и заканчивая рентгеновской областью) за счет изменения скорости движения электронов, периода или индукции магнитного поля.

Впервые предположения о существовании СИ были высказаны в работе советских физиков Д. Иваненко и И. Померанчука в 1938 г. [8]. Эта и последующие их работы произвели революцию в ускорительной физике и технике [9]. Основные особенности СИ – спектральное и угловое распределения – впервые изучены в работах Л. Арцимовича и И. Померанчука в 1946 г., где были получены основные формулы, описывающие излучение релятивистских электронов в магнитных полях [10].

История развития ЛСЭ начинается с работы В. Гинзбурга [11], вышедшей в 1947 г., в которой он впервые рассмотрел спонтанное излучение релятивистских электронов, распространяющихся в пространственно-периодических магнитных структурах. Позже устройства для создания периодического магнитного поля на пути электронного пучка были названы ондуляторами (от французского *onduler* – завиваться), а генерируемое ими излучение – ондуляторным (рис. 4). В [11] рассматривались также вопросы генерации когерентного излучения одним коротким сгустком электронов или группой микросгустков с расстоянием (периодом) между сгустками, равными длине волны. Способы создания микросгустков тогда не обсуждались.

Первые устройства, генерирующие когерентное излучение с применением пучка свободных электронов, – микроволновые лампы и клистроны – созданы в 1940-х годах и применялись в качестве мощных СВЧ-генераторов в радарах. В таких приборах кинетическая энергия электронов

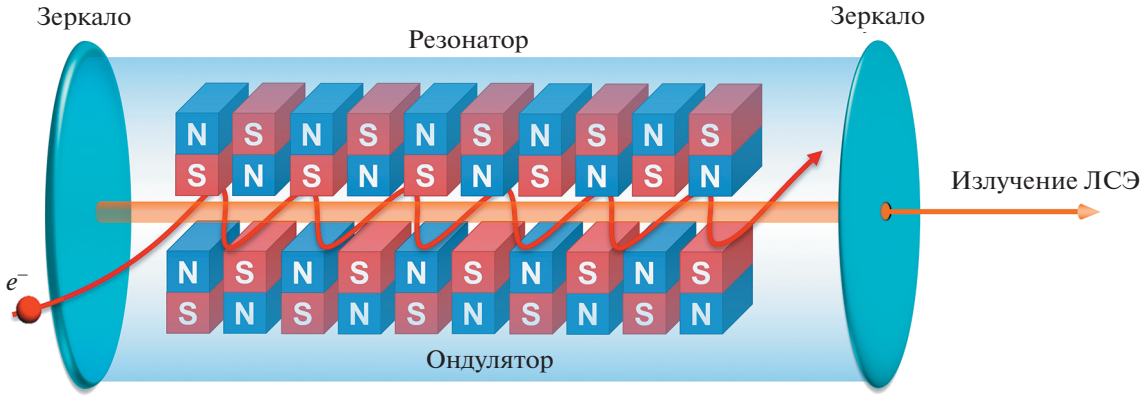


Рис. 5. Схема лазера на свободных электронах с объемным резонатором.

преобразуется в энергию электромагнитного поля при их взаимодействии с бегущей (замедляющей) волной.

В 1951 г. Г. Мотц предложил [12], а через два года экспериментально реализовал [13] новый способ генерации электромагнитной волны с применением переменной магнитной структуры. В 1959 г. Р. Филипсом были представлены результаты создания первого прототипа ЛСЭ – убитрона – СВЧ-генератора, основанного на эффекте усиления спонтанного излучения пучка нерелятивистских электронов, распространяющихся в ондуляторе, т.е. на вынужденном ондуляторном излучении [14]. Переход на релятивистские энергии позволил значительно уменьшить длину волны генерируемого излучения [15].

Концепция ЛСЭ представлена в 1971 г. в работе Д. Мэди [16], первая генерация предложенного устройства на длине волны 10.6 мкм была продемонстрирована Л. Элиасом и Д. Мэди с коллегами в 1976 г. [17].

В результате этих и многих последующих работ сформировалась классическая схема мазера и ЛСЭ, которая схожа со схемой классического лазера и представляет собой помещенный в резонатор ондулятор (рис. 5). Основная проблема такой конфигурации для коротковолновых (рентгеновских) лазеров заключается в отсутствии подходящих отражателей для длин волны порядка ангстрема и меньше.

Настоящий прорыв в создании коротковолновых (рентгеновских) ЛСЭ произошел после публикации в 1980 г. работы новосибирских физиков Е. Салдина и А. Кондратенко [18], в которой впервые были представлены теория и общая схема безрезонаторного однопроходного ЛСЭ, основанная на открытом авторами эффекте самоусиления спонтанного излучения (**ССИ**, SASE – Self-Amplified Spontaneous Emission). Предложенная схема ЛСЭ позволила перейти к высокоэнергетичному коротковолновому излучению и получить экспоненциальное усиление за счет коллективного эффекта [19].

В режиме ССИ в результате взаимодействия электромагнитного излучения и электронов в ондуляторе происходит перераспределение электронного пучка в микропучки, расстояние между которыми равно длине волны генерируемого излучения (рис. 6). В процессе прохождения сгустка релятивистских электронов вдоль ондулятора электромагнитная волна, рожденная электронами в конце сгустка, набегает и воздействует на впереди идущие электроны, и в зависимости от положения в сгустке и фазы набегающей волны одни электроны ускоряются, а другие замедляются. В результате такого взаимодействия электроны группируются в микропучки, представляющие собой когерентные элементарные излучатели, генерирующие когерентное рентгеновское излучение, схожее по характеристикам с излучением классического лазера. Выход в режим самоусиления и последующего насыщения требует некоторого времени и достигается при значительном увеличении длины ондулятора в сравнении с ондулятором СИ.

Первые эксперименты по реализации ССИ-режима были выполнены в конце 1980-х годов. Существенный вклад в эти работы внесли сотрудники Курчатовского института. В группе А. Варфоломеева изготовили ондулятор (рис. 7), имеющий длину 0.6 м, с помощью которого совместно с научной группой К. Пеллегрини из Калифорнийского университета в Лос-Анджелесе были проведены измерения усиления в ССИ-режиме для длины волны 1.6 мкм [20, 21]. Следующим важным шагом стала экспериментальная реализация предсказанного Е. Салдиным режима насыщения усиления [22].

Эксперименты по реализации ССИ-режима в коротковолновой области появились только в

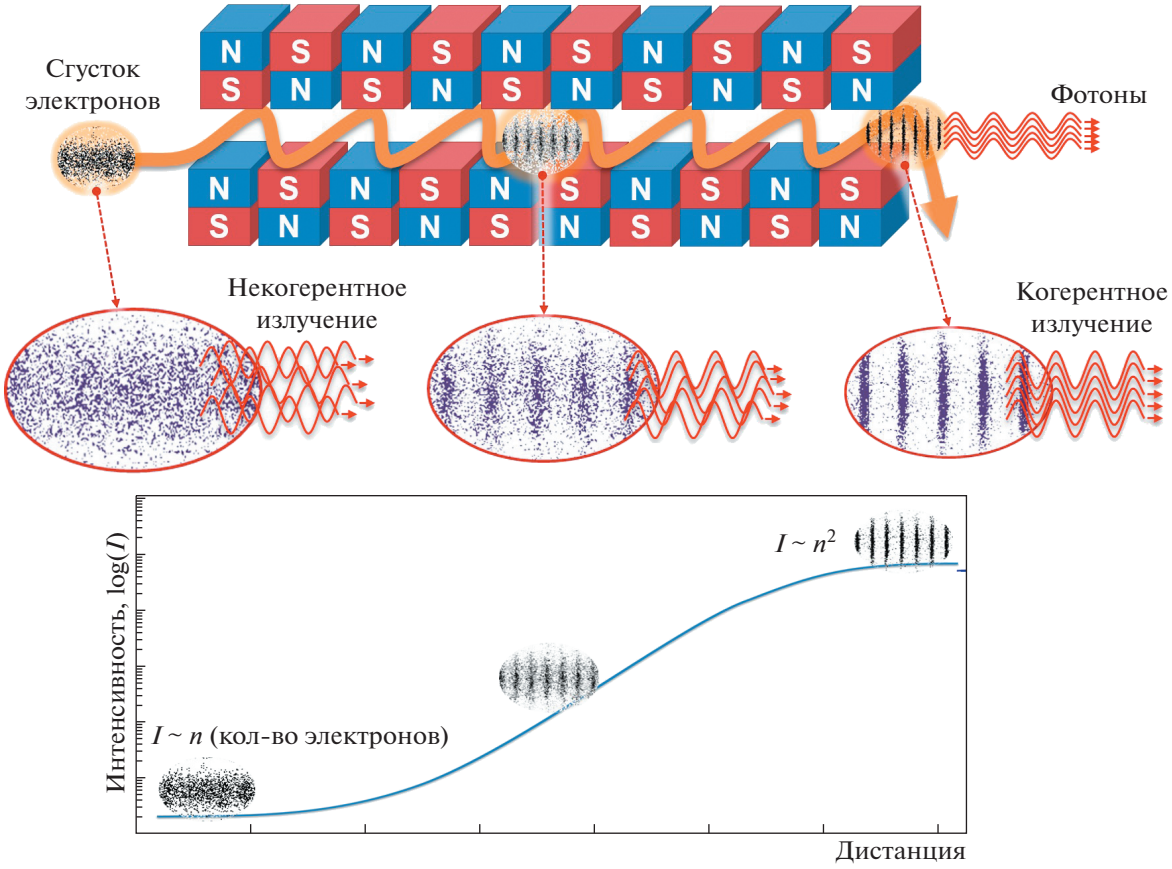


Рис. 6. Самосогласованная спонтанная эмиссия (SASE) в ондуляторе коротковолнового лазера на свободных электронах.

конце 1990-х годов. Один из них был реализован в Немецком электронно-синхротронном центре DESY в рамках проекта TESLA. Лазерная ССИ-генерация была продемонстрирована для вакуумной ультрафиолетовой (**ВУФ**) области [23]. На основе 15-метрового ондулятора создали безрезонаторный однопроходный ЛСЭ, позволяющий усиливать сигнал в диапазоне длин волн 80–120 нм (наименьшая длина волны, достигнутая в то время). Длительность генерируемого импульса излучения лазера составляла ~50 фс.

3. ЛАЗЕРЫ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ КОРОТКОВОЛНОВОГО ДИАПАЗОНА

Одна из наиболее популярных схем современного коротковолнового ЛСЭ (на этих принципах построены практически все известные коротковолновые ВУФ и рентгеновские лазеры) представляет собой совокупность трех основных систем: фотоинжектор, линейный ускоритель и специальный протяженный ондулятор для генерации когерентных лазерных импульсов [24] (рис. 8).

Сформированный в инжекторе короткий и высокоинтенсивный сгусток электронов разгоняется в ускорителе до скоростей, составляющих 99.999% скорости света, энергия пучка при этом достигает величин от единиц до десятков ГэВ. Достигнув необходимой энергии, сгусток электронов влетает в ондулятор ЛСЭ. По мере пролета электронного сгустка через ондулятор в какой-то момент спонтанно начинается и выходит в насыщение режим ССИ, интенсивность излучения при этом экспоненциально возрастает. Благодаря этому механизму яркость рентгеновского ЛСЭ существенно, на 6 и более порядков, превышает яркость самых мощных на сегодня источников рентгеновского излучения – синхротронов четвертого поколения, полный поток фотонов одиночного импульса РЛСЭ превышает поток синхротронного сгустка на 4 порядка (рис. 9).

В настоящее время существуют несколько действующих рентгеновских лазеров на свободных электронах: FERMI@Elettra в Италии (длина волны 4 нм) [25], LCLS в Национальной лаборатории ускорителей SLAC в США (1.5 Å) [26], SACLA в институте Харимы в Японии (0.8 Å) [27], SLS в Швейцарии (1 Å) [28], PAL-XFEL (0.6 Å)

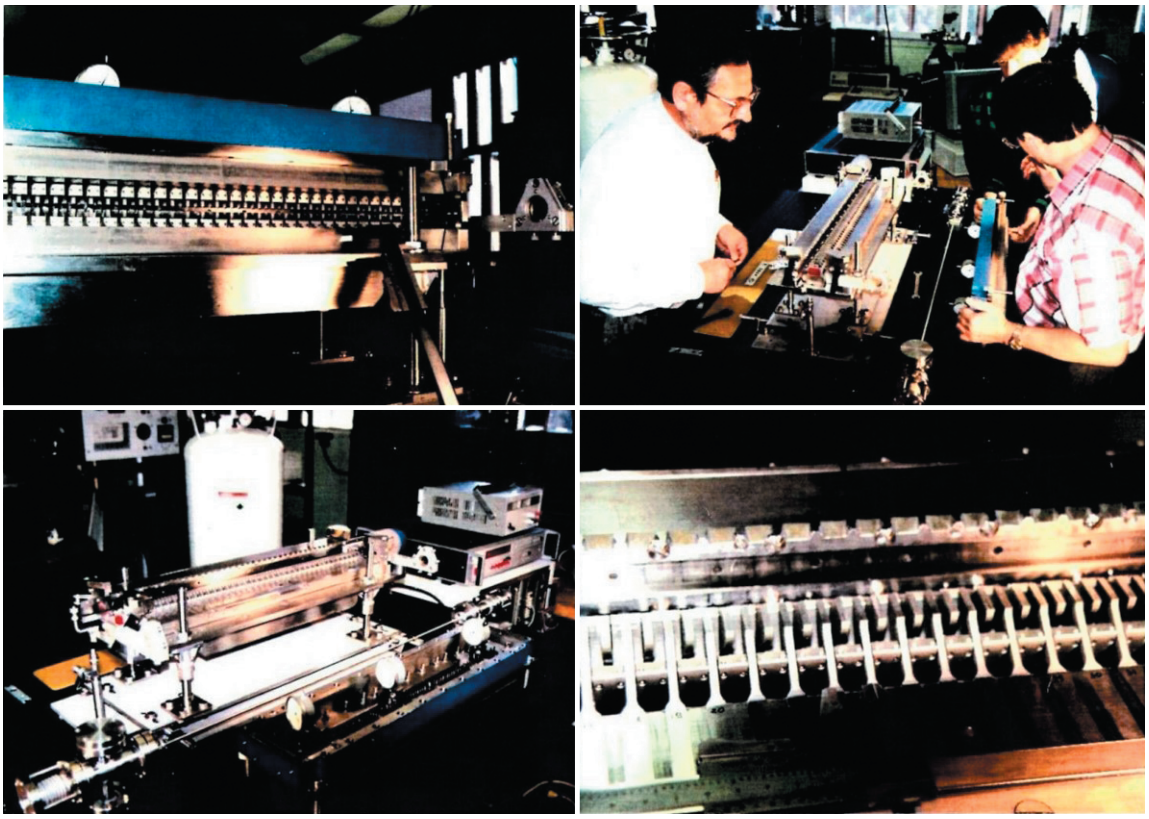


Рис. 7. К. Пеллегрини и А. Хлебников. Последние тесты. Курчатовский институт, 1985 г.

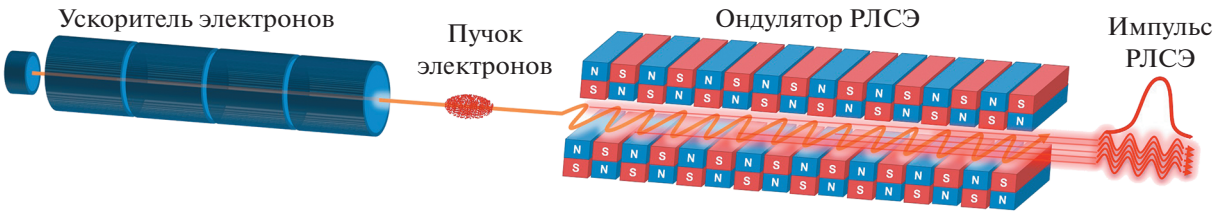


Рис. 8. Классическая схема коротковолнового ЛСЭ.

в Южной Корее и установки FLASH (4.2 нм) [29] и XFEL (0.5 Å) в Германии. Основные параметры и характеристики действующих ЛСЭ представлены в табл. 1.

4. ЕВРОПЕЙСКИЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ ЛАЗЕР НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

Международный проект по созданию XFEL стартовал в 2009 г. при активном участии России и объединил на тот момент 11 стран-участников: Германию, Россию, Венгрию, Данию, Испанию, Италию, Польшу, Словакию, Францию, Швейцарию и Швецию. Стоимость проекта превышает 1.2 млрд евро, финансовый вклад Германии составляет 50%, доля участия России – вторая по значимости и составляет более 26%, а вклады остальных стран-участников варьируются от 1 до 3%.

В международную научную коллаборацию по созданию компонентов XFEL входит целый ряд российских научных организаций: НИЦ “Курчатовский институт” (Москва, Протвино, Санкт-Петербург); ИЯИ РАН (Москва), ФНИЦ “Кристаллографии и фотоники” РАН (Москва), ИЯФ СО РАН (Новосибирск), НИИЭФА им. Ефремова (Санкт-Петербург), ОИЯИ (Дубна), ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН (Санкт-Петербург), МИФИ (Москва), МФТИ (Москва), МГУ им. М.В. Ломоносова (Москва) и другие.

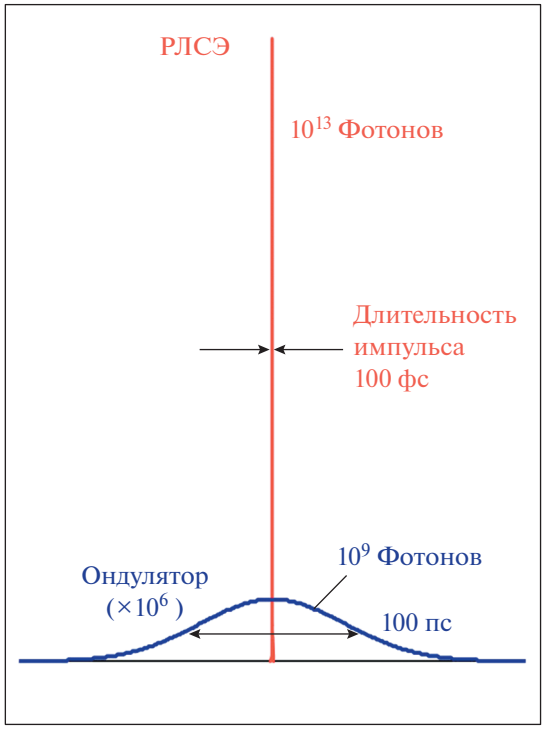


Рис. 9. Сравнение единичного импульса РЛСЭ и источника СИ третьего поколения (ондулятор).

Курчатовский институт – научный координатор и руководитель российского участия в проекте в соответствии с Распоряжением Правительства Российской Федерации. Большой научный потенциал и многолетний опыт Курчатовского института в области применения рентгеновского, синхротронного и нейтронного излучений позволили Центру участвовать в Проекте XFEL во всех аспектах и на всех уровнях. Вступление России в проект XFEL было инициировано в 2007 г. директором Курчатовского института М.В. Ковальчуком и министром науки и образования РФ А.А. Фурсенко и поддержано президентом Российской Федерации В.В. Путиным.

Общая схема XFEL показана на рис. 10. Инжектор, расположенный в самом начале двухкилометрового тоннеля ускорителя, предназначен для формирования электронных сгустков, поступающих в основной ускоритель. Электроны формируются в инжекторе в результате воздействия сверхкоротких импульсов мощного УФ-лазера на вольфрамовый фотокатод. Оптическая генерация позволяет получить интенсивный и сжатый во времени сгусток электронов, необходимый для режима ССИ. Электроны в сгустке ускоряются в уникальном сверхпроводящем линейном ускорителе, который обеспечивает высокую частоту повторений импульсов и энергию электронов 17.4 ГэВ, необходимую для генерации излучения в рентгеновском диапазоне до 0.5 Å.

Общая длина ускорителя XFEL составляет 1.7 км. Для ускорения электронов используются 768 сверхпроводящих ниобиевых резонаторов, работающих при температуре до –271°C. Ускоренные до необходимых энергий электроны проходят участки разветвления и попадают в фотонный тоннель, в котором установлены ондуляторы – генераторы рентгеновского когерентного излуче-

Рис. 10. Расположение Европейского рентгеновского лазера на свободных электронах в Гамбурге и Шенефельде.

Таблица 1. Основные параметры и характеристики действующих лазеров на свободных электронах

Установка	European XFEL	LCLS	SACLA	SwissFEL	PAL-XFEL
Место нахождения	Германия	США	Япония	Швейцария	Южная Корея
Технология ускорителей	Сверхпроводящая	Нормально-проводящая	Нормально-проводящая	Нормально-проводящая	Нормально-проводящая
Импульсы в секунду	27000 (4.5 МГц)	120	60	100	60
Минимальная длина волны, Å	0.5	1.5	0.8	1	0.6
Максимальная энергия электронов, ГэВ	17.5	14.3	8.5	5.8	10
Установка	European XFEL	LCLS	SACLA	SwissFEL	PAL-XFEL
Место нахождения	Германия	США	Япония	Швейцария	Южная Корея
Технология ускорителей	Сверхпроводящая	Нормально-проводящая	Нормально-проводящая	Нормально-проводящая	Нормально-проводящая
Импульсы в секунду	27000 (4.5 МГц)	120	60	100	60
Минимальная длина волны, Å	0.5	1.5	0.8	1	0.6
Максимальная энергия электронов, ГэВ	17.5	14.3	8.5	5.8	10
Длина установки	3.4 км	3 км	0.75 км	0.74 км	1.1 км
Число ондуляторов	3	1	3	1	2
Число экспериментальных станций	6	5	4	3	3
Пиковая яркость	5×10^{33}	2×10^{33}	10^{33}	10^{33}	1.3×10^{33}

ния. Основные компоненты ускорителя и оборудование экспериментальной станции показаны на рис. 11.

Для достижения насыщения в режиме ССИ, максимальной яркости и степени когерентности требуется протяженный ондулятор, состоящий из большого числа магнитов. Ондуляторы линий жесткого рентгена (3–25 кэВ) SASE1 и SASE2 имеют длину 175 м, состоят из 35 секций (каждая длиной 5 м) и содержат более чем 17000 постоянных магнитов. Ондулятор для линии мягкого рентгена (0.2–3 кэВ) SASE3 состоит из 21 секции и имеет длину 105 м. Период магнитной структуры ондуляторов составляет 4 см, при этом коэффициент ондуляторности варьируется в диапазоне 1.65–3.9. Основные параметры ондуляторов представлены в табл. 2. Схема расположения ондуляторных каналов и ондуляторов в тоннеле показана на рис. 12.

На сегодня среди всех реализованных проектов рентгеновских лазеров на свободных электронах (XFEL, LCLS, SACLA, SwissFEL и PAL-XFEL) европейский проект лидирует по всем основным параметрам: энергия электронов, частота и яркость импульса, энергия (длина волны) генерируемого излучения. Применение сверхпроводящих магнитов в линейном ускорителе позволило достичь рекордных значений по частоте рентгеновских импульсов – до 4.5 МГц при общем количестве 27000 импульсов в секунду. Такая частота импульсов обеспечивает чрезвычайно высокую среднюю яркость, которая более чем на 2 порядка выше, чем на других ЛСЭ, и позволяет существенно сократить время эксперимента.

На рис. 13 показана структура импульсов XFEL. Рентгеновские импульсы генерируются в виде пакетов (серий), состоящих из 2700 импульсов с интервалом между отдельными импульсами

Таблица 2. Основные параметры ондуляторов

	SASE1, SASE2	SASE3
Длина волны, нм	0.4–0.05	4.7–0.4
Энергия фотона, кэВ	3–25	0.26–3
Экспериментальные станции	SPB/SFX, FXE SASE 1) MID, HED (SASE 2)	SQS, SCS
Магнитная длина, м	175	105

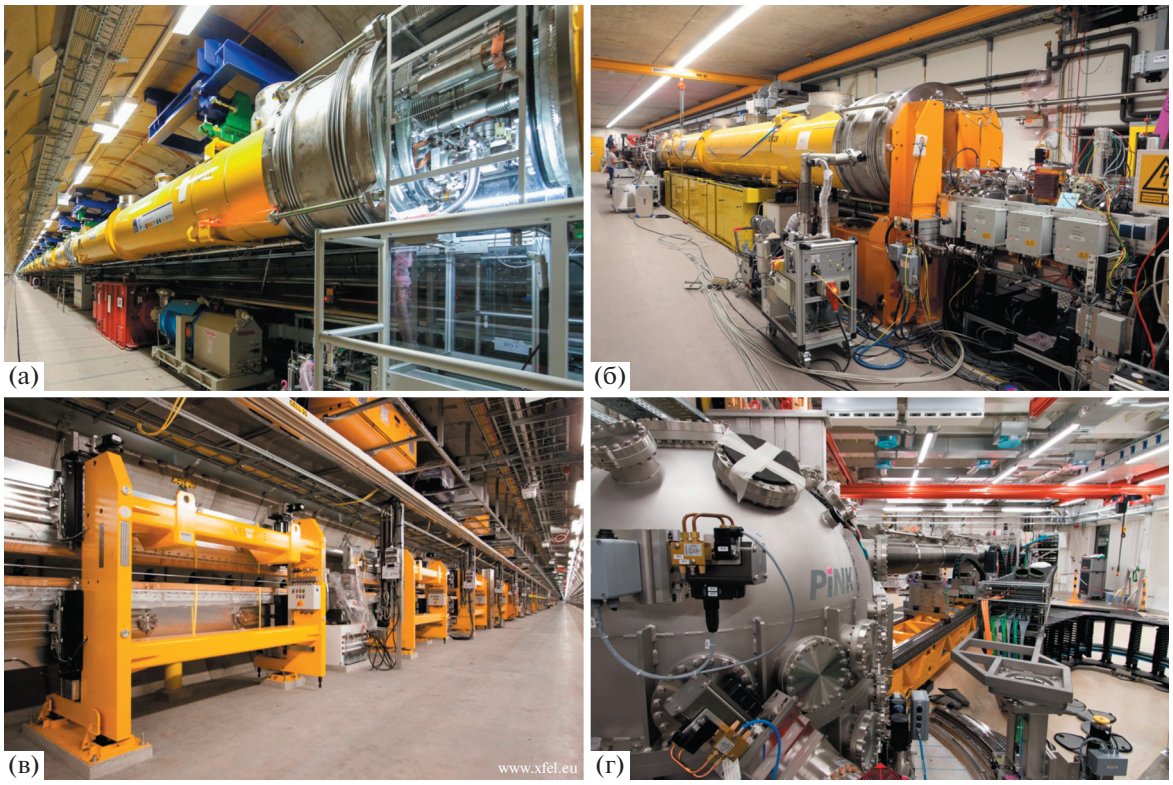


Рис. 11. Основные компоненты Европейского лазера на свободных электронах: а – ускорительный тоннель, б – инжектор, в – ондуляторы, г – экспериментальная станция MID (Materials imaging and dynamics) – визуализация и динамика материалов.

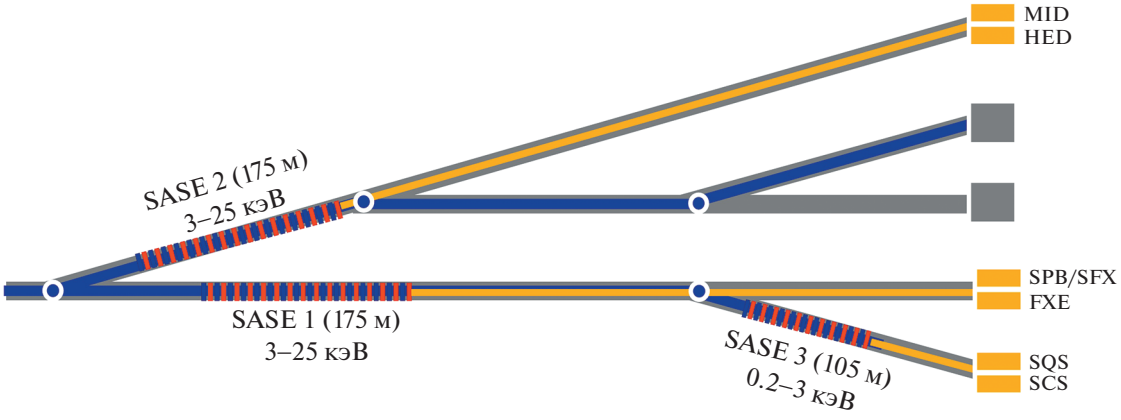


Рис. 12. Схема подземного экспериментального зала. Станции источника SASE 1: FXE – фемтосекундные рентгеновские эксперименты; SPB/SFX – структура единичных частиц, кластеров и биомолекул, серийная кристаллография с фемтосекундным разрешением. Станции источника SASE 2: MID – визуализация и динамика материалов; HED – материя с высокой плотностью энергии. Станции источника SASE 3: SCS – спектроскопия и когерентное рассеяние; SQS – малые квантовые системы.

в пакете до 220 нс, что соответствует максимально возможной частоте импульсов рентгеновского лазера – 4.5 МГц. Для определенных экспериментов частота импульсов внутри пакета может быть снижена. Длительность каждого пакета импульсов составляет 0.6 мс, частота – 10 Гц. Пакеты импульсов разделены промежутком 99.4 мс, который используется для выгрузки данных с де-

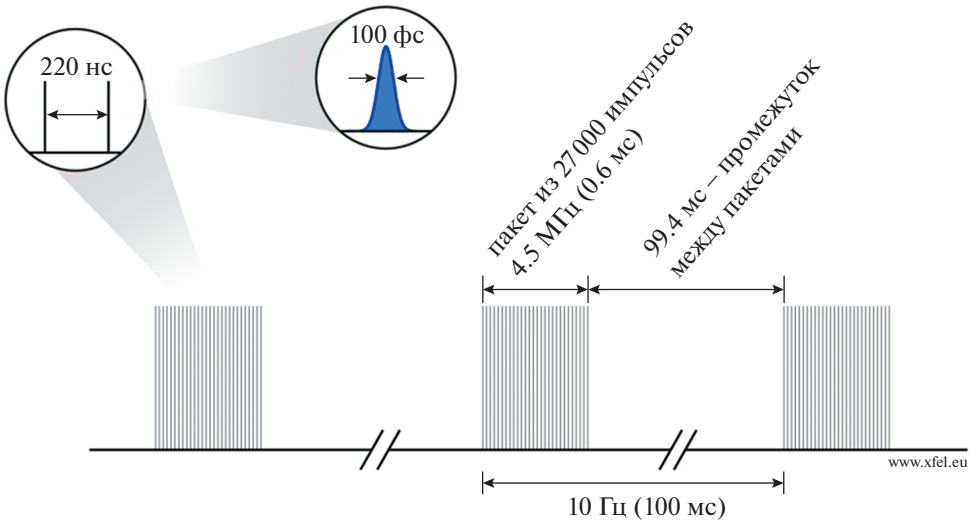


Рис. 13. Временная структура импульсов XFEL.

текторов и релаксации инжекторных и ускорительных систем.

5. ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ СТАНЦИИ И ИНСТРУМЕНТЫ

В подземном экспериментальном зале XFEL размещены шесть исследовательских станций с возможностью увеличения их количества до десяти. Станции располагаются на одном из ондуляторных каналов (по две станции на канал) и представляют собой набор исследовательских инструментов, сконфигурированных для конкретных задач и экспериментов (табл. 3), требующих рентгеновского пучка с определенными параметрами. Например, для получения изображения отдельных частиц, таких как биомолекулы, необходимо излучение с короткой длиной волны, тогда как исследование малых объектов в сильных полях требует высокой интенсивности и более длинных волн. В связи с этим применяются два типа ондуляторов для мягкой и жесткой рентгеновской области, также реализована возможность дополнительно настраивать параметры пучка рентгеновского лазера, такие как длина волны, мощность и частота импульсов, в зависимости от требований реализуемых экспериментов.

Все шесть исследовательских станций имеют схожую базовую конфигурацию и схему инструментального оснащения:

– серия зеркал, линз, монохроматоров и аттенюаторов для фокусировки и формирования рентгеновских импульсов;

– системы диагностики рентгеновского пучка и спектрометры;

– среда для образца, где импульсы рентгеновского лазера взаимодействуют с образцом, включая различные системы доставки образцов и оптические лазерные системы для их фотовозбуждения;

– один или несколько детекторов (для измерения рассеяния и дифракции рентгеновского излучения) и спектрометры (для измерения поглощенного рентгеновского излучения и вторичных эффектов, рентгеновская флуоресценция и фотоэлектронная и ионная спектроскопия).

5.1. Станция “Фемтосекундные рентгеновские эксперименты” (Femtosecond X-ray Experiments, FXE)

Станция “Фемтосекундные рентгеновские эксперименты” нацелена на исследования фундаментальных процессов в физике, химии и биологии, происходящих в ультракоротком временном диапазоне, характерном для образования химических связей, изменения спиновых состояний, молекулярных механизмов транспорта энергии и заряда. Основные задачи станции – изучение сверхбыстрой атомной, молекулярной и электронной динамики в условиях химических и биохимических реакций, структурных и фазовых превращений в жидкостях и твердых телах.

Инструментально-методическое оснащение станции обеспечивает доступ к атомной структуре с субангстремным разрешением одновременно с определением химического состояния атомов, электронных и спиновых состояний во временных масштабах до десятков фемтосекунд, что позволяет на принципиально новом уровне изучать процессы формирования материалов и перестройки их структуры, химические и биологические процессы, фотосинтез и фотоэлектрические и каталитические реакции и др. [30–33]. Основ-

Таблица 3. Исследовательские станции и инструменты Европейского рентгеновского лазера

Станция	Описание	Тонкие структуры	Сверхбыстрые процессы	Экстремальные состояния
FXE	Фемтосекундные рентгеновские эксперименты: исследования динамики твердых тел, жидкостей, газов с временным разрешением		✓	
HED	Материя с высокой плотностью энергии: исследование вещества в экстремальных состояниях с использованием жесткого рентгеновского излучения ЛСЭ		✓	✓
MID	Визуализация и динамика материалов: определение структуры нанообъектов и динамика в наномасштабе	✓	✓	
SCS	Спектроскопия и когерентное рассеяние: электронная и атомная структура и динамика наносистем и биологических объектов с использованием мягкого рентгеновского излучения	✓	✓	
SPB/SFX	Сверхбыстрая когерентная дифракционная визуализация отдельных частиц, кластеров и биомолекул: определение структуры отдельных частиц (атомных кластеров, биомолекул, вирусных частиц, клеток), последовательная фемтосекундная кристаллография	✓	✓	
SQS	Малые квантовые системы: исследование атомов, ионов, молекул и кластеров в интенсивных полях и нелинейных явлениях		✓	✓

ные параметры станции представлены в табл. 4. Станция расположена на канале ондулятора SASE1 – источника когерентного жесткого рентгеновского излучения в диапазоне 5–20 кэВ. Проектные значения энергии импульса источника на станции – более 4 мДж при 5–20 кэВ [34].

Из-за сверхвысокого фотонного потока и малой расходимости (2 мкрад при 10 кэВ) на выходе ондулятора оптические элементы станций могут быть установлены на расстоянии не менее 200 м для обеспечения оптимальной тепловой нагрузки. Оптическая система станции (рис. 14) состоит из набора коллимирующих составных бериллиевых линз (**CRL**) и трех фокусирующих рентгеновских зеркал, установленных в тоннеле и собирающих полный поток излучения от ондулятора, четырехкратного монохроматора Si(111) с полосой пропускания $\Delta\lambda/\lambda$ 10^{-4}, установленного в оптическом боксе (хатче). В экспериментальном боксе размещен дополнительный набор бериллиевых линз, который обеспечивает фокусировку рентгеновского импульса на образце в диапазоне 8–200 мкм (14 кэВ).

Для ориентации и сканирования твердотельных образцов применяется гониометр Huber с 10 степенями свободы, возможна также альтернативная конфигурация с установкой каппа-гониометра. Для работы в условиях интенсивной тепловой и радиационной нагрузки предусмотрена процедура сканирования твердотельных образцов, которая позволяет быстро менять область засветки образца рентгеновским лазером или менять образец целиком.

Жидкие образцы и растворы доставляются через кварцевые форсунки (инжекторы) с круглым отверстием различного диаметра – 50, 100 или 150 мкм, при этом скорость водяной струи достигает 30–60 м/с, что позволяет обновлять объем пробы между импульсами рентгеновского лазера.

Среда для образца формируется в герметичной камере с большими каптоновыми окнами для одновременного сбора данных в условиях рассеянных рентгеновских лучей и рентгеновской эмиссии, окнами для ввода лучей оптических лазеров и установки микроскопов. Камера может быть заполнена инертным газом (He или N_2) для обеспечения анаэробной или сухой атмосферы.

Станция снабжена основным 2D-детектором для измерения рассеяния и дифракции рентгеновских лучей – LPD-1M (Large pixel detector) [35]

и двумя независимыми рентгеновскими спектрометрами с высоким энергетическим разрешением: дисперсионным спектрометром Фон Хамоса (von Hamos) [36] и сканирующим спектрометром Иоганна (Johann) [37]. Также возможна установка дополнительных детекторов 0D APD и др. Системы установки и позиционирования образца, детектор и спектрометры показаны на рис. 15.

Спектрометр Фон Хамоса с дисперсией по длине волны состоит из 16 независимо управляемых цилиндрических кристаллов-анализаторов с радиусом изгиба 0.5 м и позволяет измерять всю форму линий излучения за один рентгеновский снимок (или серию) без сканирования. Спектры излучения отдельных кристаллов фокусируются и накладываются на детектор Jungfrau 1M, работающий с частотой кадров 10 Гц.

Спектрометр Иоганна состоит из пяти независимо управляемых сферических кристаллов-анализаторов с радиусом кривизны 1 м и работает в режиме сканирования. Сигналы излучения собираются установленными на роботизированном манипуляторе 2D-детекторами Jungfrau или 0D APD. Высокая энергия фотонов, яркость и частота повторения импульсов Европейского рентгеновского лазера предъявляют высокие требования к основному детектору рассеяния и дифракции. Детектор LPD – гибридный детектор, состоящий из 16 кремниевых модулей (256 × 256 пикселей размером 500 мкм). Каждый пиксель имеет 512 ячеек аналоговой быстрой памяти с временем записи менее 100 нс и три уровня усиления (1, 10 и 100). Таким образом, детектор может записывать до 510 однократных рентгеновских изображений для каждой последовательности рентгеновских импульсов при максимальной частоте работы рентгеновского лазера (4.5 МГц) и обеспечивает при этом широкий динамический диапазон энергий до 10^5 и субоднофотонный шум на уровне 12–14 кэВ.

Применение акустооптических устройств и методов [38–50] для быстрого управления импульсами или сериями импульсов рентгеновского лазера представляется перспективным и для реализации экспериментов с временным разрешением с акустической перестройкой рентгенооптической схемы или сканирования образца в широком диапазоне частот от десятков герц до нескольких мегагерц. Инструментальное оснащение станции позволяет реализовать в сверхвысоких временных масштабах широкий набор исследовательских методик, основанных на рентгеновской дифракции и спектроскопии:

– дифракция рентгеновских лучей (XRD);

– диффузное рассеяние рентгеновских лучей (XDS) и рентгеновское рассеяние в области широких углов (WAXS);

Таблица 4. Параметры станции “Фемтосекундные рентгеновские эксперименты”

Энергия фотона	5–20 кэВ
Полоса пропускания $\Delta E/E$	10^{-3} (источник SASE1) 10^{-4} (Si (111) четырехкратный монохроматор)
Поляризация	Линейная (в горизонтальной плоскости)
Длительность импульса	50 фс
Мощность импульса	1 мДж (при 10 кэВ)
Размер пучка	от 8 до 200 мкм (несколько систем Велинз)
Специальная оптика	– Стандартный четырехканальный Si(111)-монохроматор – Два вторичных кристаллических спектрометра (фон Хамоса, Иоганна)
Оптические лазеры	800 нм (0.1–1 мДж, 15–100 фс) 800 нм (200 мкДж, 50 фс, 15 фс) 1030 нм TOPAS UV–vis–NIR (>20 мДж, 850 фс) 0.3 ТГц (>50 мкДж)
Детекторы рентгеновского излучения	– LPD (2D, 1 Мрх, (500 мкм) размер пикселя, 512 кадров при 4.5 МГц, трехкратное динамическое усиление, охватывающее от 1 (SP при 12 кэВ) до 10^4 на пиксель) – Gotthard (1D, 1280 пикселей, шаг пикселя 50 мкм, 0.9 МГц) – Jungfrau (2D, 1024 × 1024 пикселей, размер пикселя 75 × 75 мкм, 10 Гц) – APD (0D, полная частота воспроизведения с МГц DAQ)

– рентгеновская эмиссионная спектроскопия (XES);

– резонансное неупругое рассеяние рентгеновских лучей (RIXS);

– спектроскопия рентгеновского поглощения: структура ближнего края поглощения рентгеновских лучей (XANES) или расширенная тонкая структура поглощения рентгеновских лучей (EXAFS);

– метод стоячих рентгеновских волн (XSW) [51–55].

Фемтосекундное временное разрешение достигается в режиме измерений накачки–зондирования (pump and probe) с применением мощных импульсных оптических лазеров. Режим накачки–зондирования основан на использовании

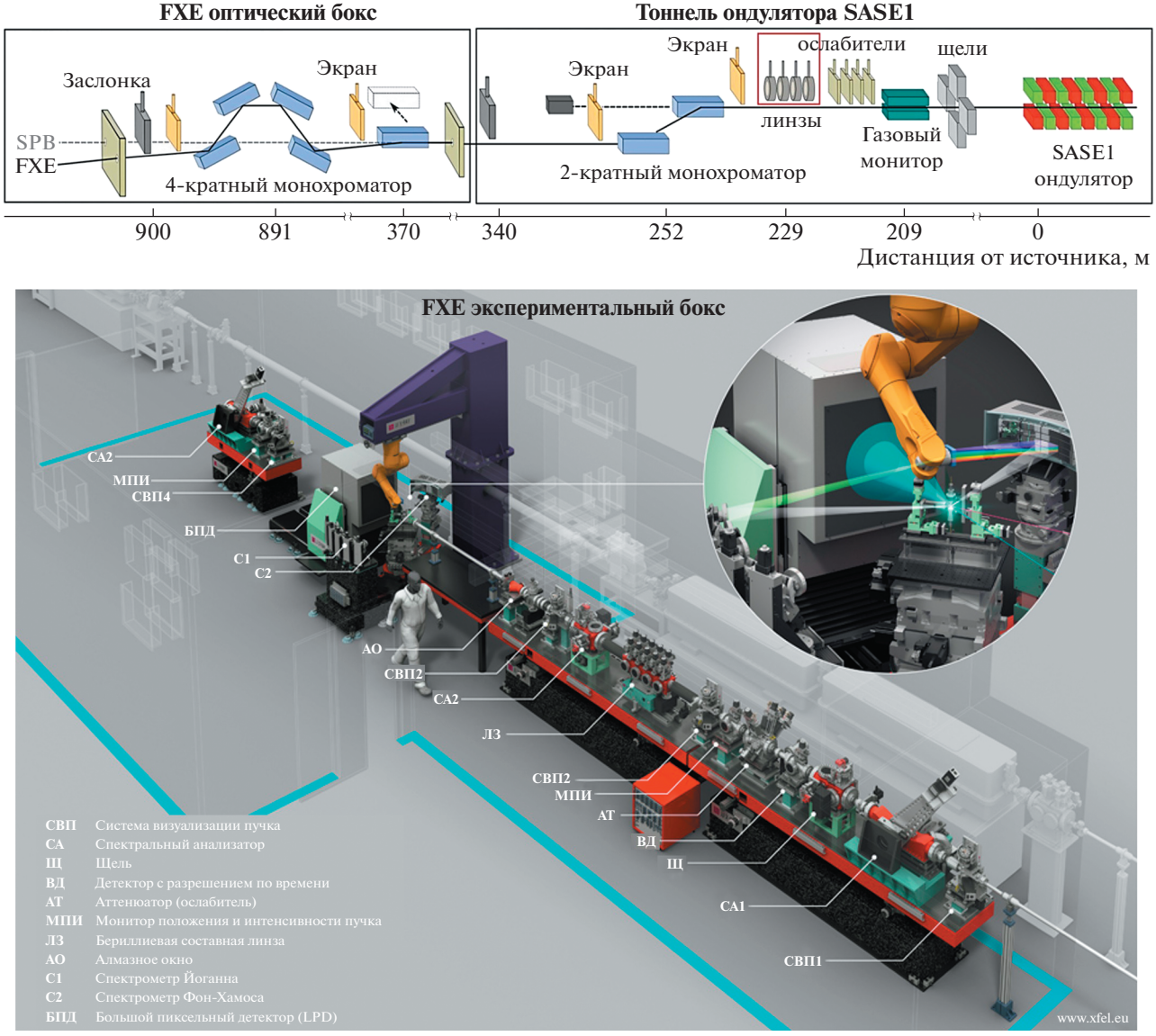


Рис. 14. Схема экспериментальной станции “Фемтосекундные рентгеновские эксперименты”.

двух ультракоротких импульсов: импульса оптического лазера в качестве накачки (pump) и рентгеновского импульса (probe) для измерения мгновенных структурных и электронных конфигураций. Импульсы попадают на образец с регулируемой задержкой, что позволяет проводить измерения в разные моменты времени после накачки (рис. 16). Таким образом, любой динамический процесс может быть представлен в виде последовательности кадров, отображающих эволюцию картины рассеяния или спектров рентгеновского излучения от образца.

Возможности станции по исследованию фотоиндуцированных сверхбыстрых процессов и переходных состояний в металлсодержащих высокомолекулярных комплексах при комбинации различных рентгеновских методик продемонстрированы в ряде работ [56–61].

Фемтосекундная сверхбыстрая рентгеновская эмиссионная спектроскопия применена для изучения фотокаталитических реакций – фотоиндуцированного переноса электрона в перспективных катализаторах на основе Co–Fe-диад [56]. Динамика возбужденного состояния и фотоиндуцированный перенос электронов от Fe-фотосенсибилизатора к Co-катализатору являются начальными процессами, определяющими принцип работы и активность диад в реакциях фотокаталитического восстановления. Перенос заряда происходит из неравновесных короткоживущих состояний (рис. 17), и обычные аналитические инструменты не обладают достаточной чув-

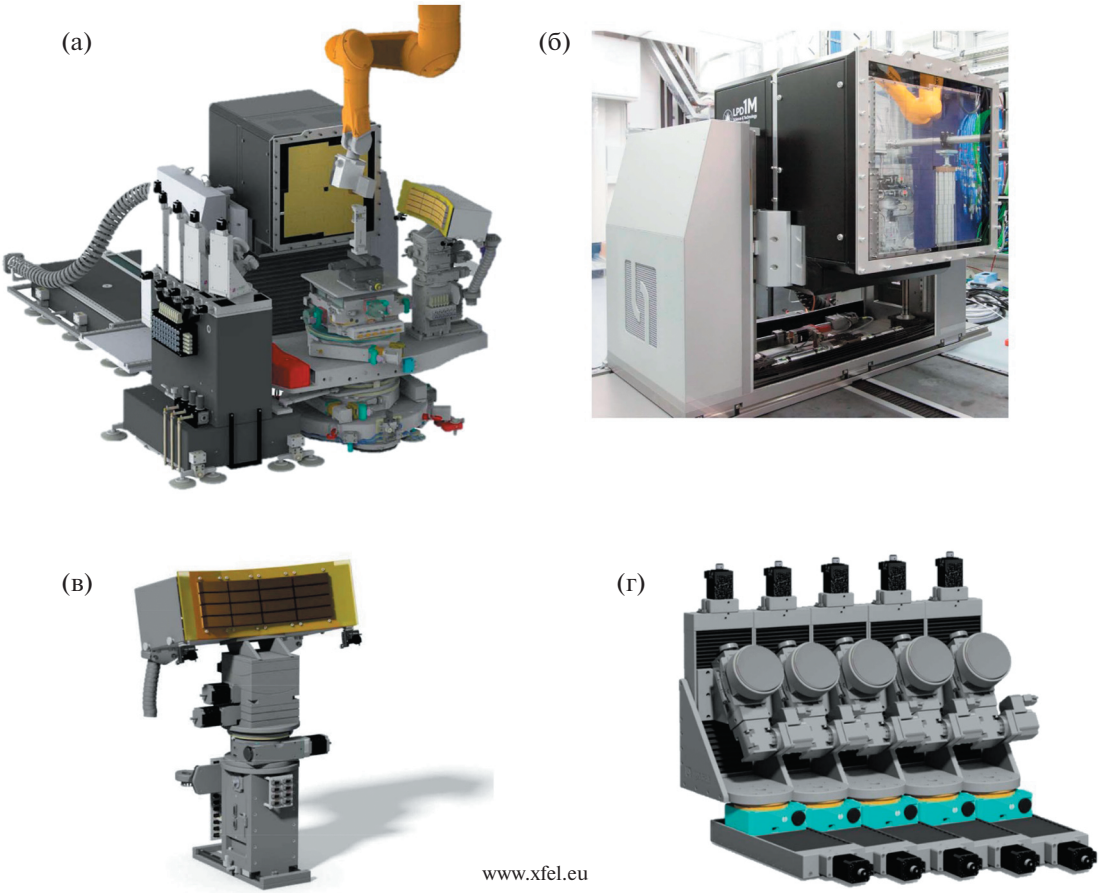


Рис. 15. Инструментальное оснащение станции FXE: а – окружение образца, б – детектор LPD-1M (Large pixel detector) – основной детектор рассеяния и дифракции, в – дисперсионный спектрометр в геометрии Фон Хамоса (von Hamos), г – сканирующий спектрометр в геометрии Иоганна (Jonann).

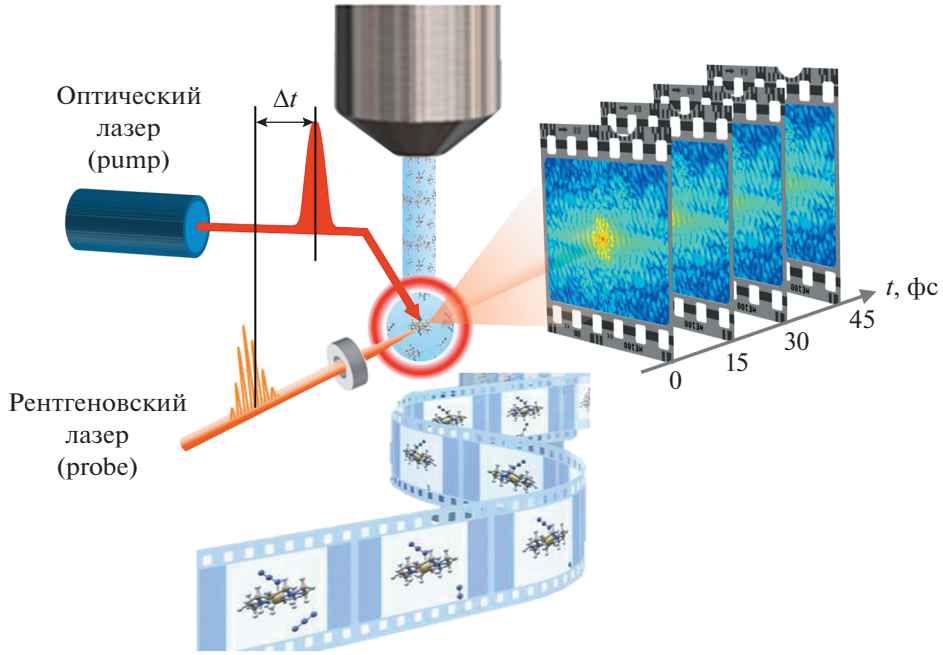


Рис. 16. Иллюстрация режима измерений накачки–зондирования (pump and probe). Для накачки используется оптический лазер. Импульс рентгеновского лазера попадает на образец после импульса накачки с некоторой регулируемой задержкой Δt. Меняя время задержки, можно получить набор дифракционных картин, соответствующих различным временным состояниям системы после накачки.

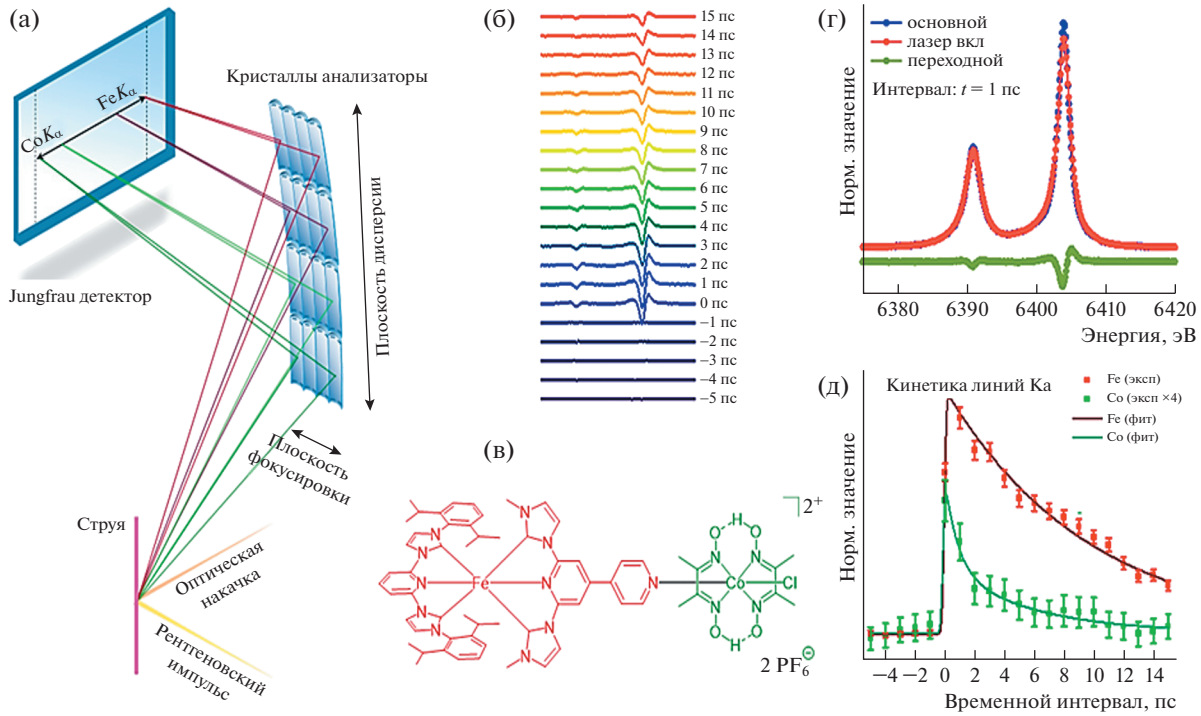


Рис. 17. Экспериментальная схема (а), набор спектров Fe$K_{\alpha 1}$ ΔXES как функция задержки времени (б), структура исследуемых диад (в), спектры основного и возбужденного состояний Fe$K_{\alpha 1}$ XES и соответствующий переходный спектр для времени задержки 1 пс (г), долгосрочная кинетика $K_{\alpha 1}$-линий Fe и Co с аппроксимацией функциями затухания флуоресценции (д).

ствительностью для изучения их корреляции с химической структурой диады.

Спиновая динамика фотоиндуцированного переключения состояния металлоорганических комплексов переходных металлов – перспективных элементов молекулярной электроники исследована в [57, 58]. Такие системы характеризуются каскадом короткоживущих спиновых состояний, сопровождающих процесс фотопоглощения. Молекулярная структура и обратимый фотоцикл комплекса Fe3 $[Fe_3(HL)_2L_2](BF_4)_4$) [62], восстановленный с применением фемтосекундной эмиссионной спектроскопии, показаны на рис. 18. Определены короткоживущие состояния $t < 10$ фс и условия, влияющие на эффективность поглощения фотонов. Полученные результаты имеют важное значение для развития эффективных схем фотопреобразования с применением металлсодержащих комплексов такого класса.

В [59] показана возможность объединения методов рентгеновского рассеяния и спектроскопии для изучения фотовозбуждения модельного соединения переходного металла $[Fe(bpy)_{-3}]^2$, схожего по структуре с Fe3. Спектры рентгеновского излучения в области линий железа K_α и K_β во временном масштабе ~100 фс получены при одновременной регистрации диаграмм широкоуглового рассеяния рентгеновских лучей, что позволило связать динамику структуры с быстрыми изменениями электронных состояний.

Фемтосекундная рентгеновская спектроскопия представляет собой эффективный инструмент для исследования структурной и электронной (спиновой) динамики биомолекул.

Работы [60, 61] демонстрируют возможности сверхбыстрой XES в раскрытии тонких деталей трансформации активного центра гемопротеинов на основе железа при высвобождении лиганда и захвате его белками. Объединение структурно-чувствительных (XANES) и спин-чувствительных (XES) методов позволило выявить тонкие особенности фотоцикла активного центра с атомом железа белка цитохрома *C* (рис. 19). В частности, показано, что фотоцикл полностью обусловлен последовательным каскадом спиновых состояний и сопровождается определенной (куполообразной) перестройкой структуры активного центра при захвате лиганда в гемовых белках [61].

Проведенные исследования позволяют получить уникальную информацию о структурной динамике функциональных макромолекул и их комплексов, детально разобраться в их функциях и молекулярных механизмах важнейших биологических процессов, таких как прием и передача энергии, дыхание, перенос и хранение кислорода, обмен другими неорганическими соединениями, апоптоз – естественная смерть клеток.

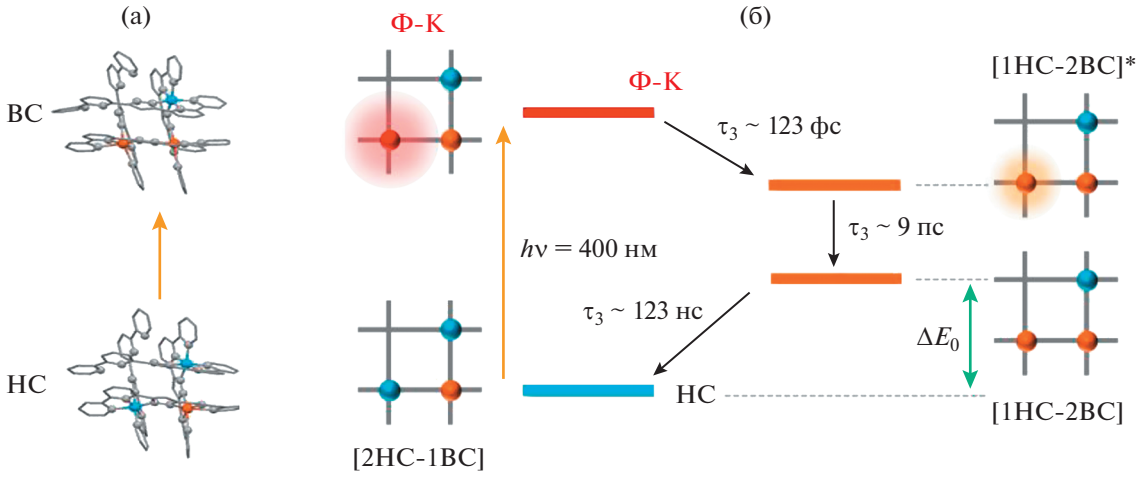


Рис. 18. Молекулярная структура Fe3. Расположение атомов Fe в основном НС (низкий спин; синий) и возбужденном ВС (высокий спин; оранжевый), состояниях ацетонитрила Fe3 (а). Схема фотоцикла для Fe3 в *Me*CN: возбужденное Ф–К (Франка–Кондона) состояние и переход в основное НС состояние через короткоживущие состояния 1НС–2ВС (б).

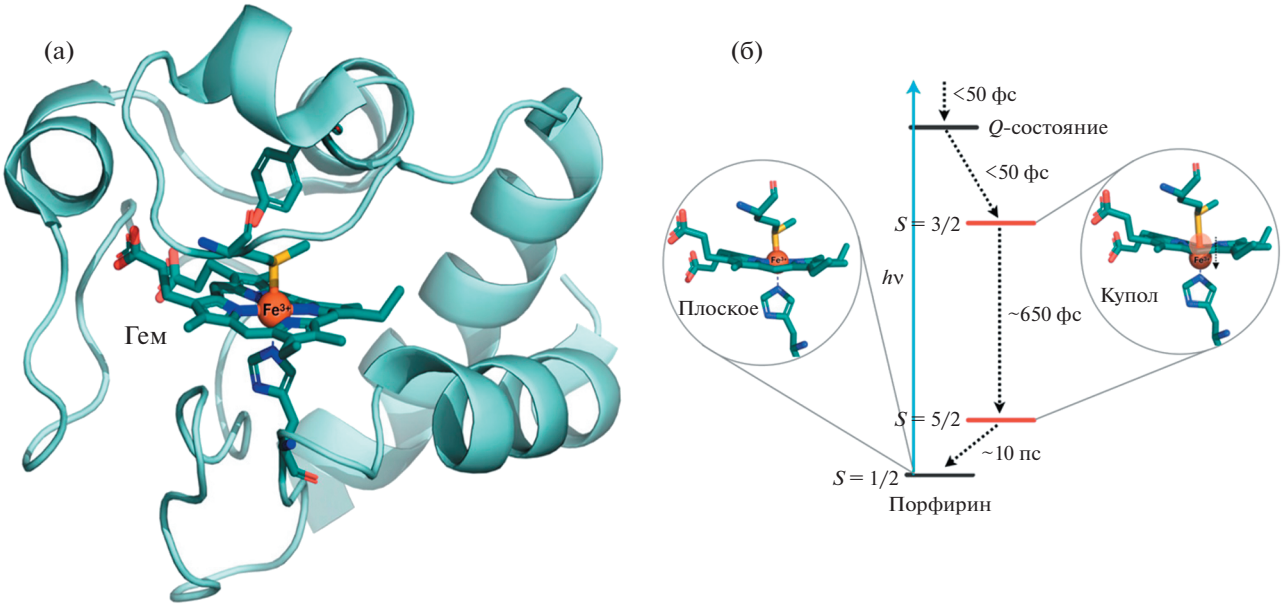


Рис. 19. Структура гема белка цитохрома *C* (а). Схематическое изображение каскада релаксации после УФ-возбуждения цитохрома *C* (б). Уровни энергии размещены произвольно. Возбуждение системы приводит к сверхбыстрому заселению и распаду *Q*-состояния (возбужденное LUMO-состояние порфирина) через состояние $S = 3/2$ (средний спин, заселяется и распадается за ~650 фс) и состояние $S = 5/2$ (высокий спин), которое затем переходит в основное состояние $S = 1/2$ за ~10 пс.

5.2. Станция "Биомолекулы, одиночные частицы, кластеры и последовательная фемтосекундная кристаллография" (Single Particles, clusters, and Biomolecules and Serial Femtosecond X-ray crystallography, SPB/SFX)

Станция "Биомолекулы, одиночные частицы, кластеры и последовательная фемтосекундная кристаллография" представляет собой основной инструмент для решения задач структурной биологии – исследования структуры и структурной динамики биологических макромолекул – белков, включая их различные комплексы, вирусов, органелл и клеток [63]. Основное применение результатов исследований на станции SPB/SFX – биология, генетика, медицина и фармакология.

Исследование функций белков, понимание сложных биологических процессов в живых системах, поиск белков-мишеней для создания новых лекарств и методов лечения болезней напрямую связаны с получением данных о простран-

Таблица 5. Параметры станции “Биомолекулы, одиночные частицы, кластеры и последовательная фемтосекундная кристаллография”

Энергия фотонов	3–16 кэВ до 25 кэВ (третья гармоника ондулятора)
Полоса пропускания	10^{-3} (полоса пропускания SASE)
Поляризация	Линейная (в горизонтальной плоскости)
Длительность импульса	1–100 фс
Мощность импульса	до 4 мДж (зависит от энергии), 10^{12} фотонов в импульсе
Размер фокуса пучка	– Область взаимодействия “upstream” – 1 и 0.1 мкм (нанофокус) – Область взаимодействия “downstream” – 1 мкм
Специальная оптика	– Область взаимодействия “upstream”: система зеркал с микрофокусом, система зеркал с нанофокусом (3–16 кэВ) – Область взаимодействия “downstream”: составные преломляющие линзы (6–16 кэВ)
Доставка образцов	– Жидкие/аэрозольные/газовые системы инжекции образцов – Система фиксированных (твердотельных) образцов
Детекторы	– AGIPD 1 Мрх (upstream), AGIPD 4 Мрх (“downstream”) – динамический диапазон: $>10^4$ (12 кэВ) – частота кадров: 4.5 МГц – расстояние образец–детектор: 0.12–6 м
Оптические лазеры	– 800 нм, до 1 мДж, 15–100 фс, – 1030 нм, >20 мДж, 850 фс – Преобразование в видимый и УФ

ственной структуре белковой макромолекулы с атомарным разрешением.

Для традиционных методов решения структуры белка с применением рентгеновских и синхротронных источников требуется кристалл белка достаточного размера и качества. При этом для целого ряда белков, включая многие ферменты и мембранные белки, кристаллизация и получение необходимого образца представляют собой сложную, а в большинстве случаев нерешаемую задачу. Например, для мембранных белков – важнейших белков для создания “таргетных” лекарственных препаратов (свыше половины известных в настоящее время лекарственных препаратов напрямую воздействуют на активность мембранных белков) определены только около одного процента структур из числа известных белков.

Сверхвысокая яркость пучка и короткая длительность импульса РЛСЭ существенно расширяют границы применимости традиционных методов белковой кристаллографии и позволяют изучать структуры сверхмалых микро- и наноразмерных образцов, а также изучать структурную динамику белковых макромолекул во временных интервалах от миллисекунд до десятков фемтосекунд.

Станция SPB/SFX [64] расположена на канале ондулятора SASE1, рабочий диапазон рентгеновского излучения на станции составляет 3–16 кэВ. Используется естественная ширина пропускания ондулятора $\Delta E/E \sim 10^{-3}$ без применения монохроматоров. Основные параметры станции показаны в табл. 5, схема станции представлена на рис. 20.

Станция имеет две экспериментальные области взаимодействия: “upstream” и “downstream”, различающиеся геометрией эксперимента, детекторами и способами фокусировки. Системы фокусирующих зеркал Киркпатрика–Баеза обеспечивают два режима фокусировки рентгеновских лучей для области “upstream”: 1 и 0.1 мкм, в области “downstream” применяются бериллиевые линзы с фокусом 1 мкм.

На станции установлены два быстрых детектора AGIPD-1M (1 мегапиксель) в области “upstream” и AGIPD-4M (4 мегапикселя) с широким полем детектирования в области “downstream”, позволяющие проводить сбор дифракционных картин с частотой до 4.5 МГц, соответствующей максимальной частоте импульсов рентгеновского лазера [65, 66]. Сбор данных на такой частоте достигается за счет использования индивидуальных ячеек аналоговой памяти, которыми снабжен каждый пиксель детектора (352 ячейки на один пиксель). Считывание происходит в перерыве (99.4 с) между сериями рентгеновских импульсов (рис. 13), в результате максимальная скорость передачи данных от AGIPD составляет 3520 записываемых изображений в секунду.

Временное разрешение в нано- и фемтосекундном масштабе достигается в режиме измерений накачка–зондирование с применением нескольких оптических лазеров с длиной волны 800 и 1030 нм, длительностью импульса от 15 до 850 фс и мощностью до 20 мДж [67].

На станции SPB/SFX реализованы два основных экспериментальных метода: последовательная фемтосекундная рентгеновская кристаллография (SFX) и когерентная дифракционная визуализация одиночных частиц (SPB).

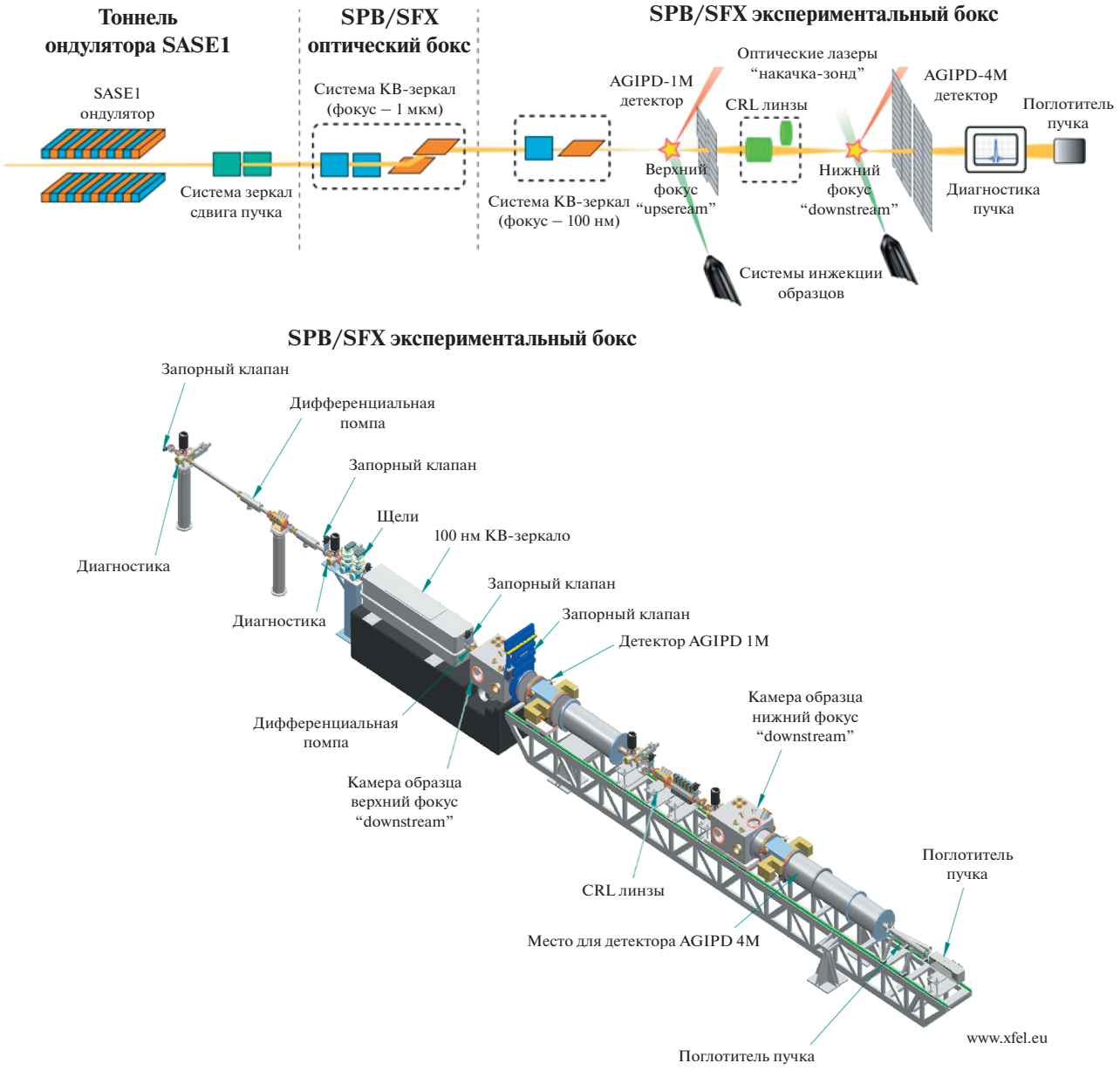


Рис. 20. Станция “Биомолекулы, одиночные частицы, кластеры и последовательная фемтосекундная кристаллография”. Жесткое рентгеновское излучение высших гармоник удаляется первичными зеркалами, установленными в тоннеле ондулятора SASE1. Оптический бокс оснащен системой фокусирующих зеркал (фокус пучка до 1 мкм). Экспериментальный бокс имеет две области взаимодействия: верхняя по потоку камера образца “upsteam” с системой фокусирующих зеркал КВ до 100 нм и детектором AGIPD-1M и нижняя камера “downsteam” с дополнительной системой составных преломляющих линз (CRL) и детектором AGIPD-4M.

Метод последовательной фемтосекундной рентгеновской кристаллографии представляет собой развитие классической белковой кристаллографии и позволяет определять атомную структуру биологических макромолекул с использованием микро- и наноразмерных кристаллов, размеры, качество и чувствительность к радиационным повреждениям которых не позволяют исследовать их на традиционных источниках рентгеновского излучения. Восстановление структуры макромолекул основано на измерении и анализе серий дифракционных изображений набора однотипных биологических кристаллов, последовательно инжектируемых в пучок рентгеновского лазера в случайной ориентации (рис. 21) [68–71].

Энергия единичного импульса ЛСЭ намного превышает порог энергетического повреждения образцов, в особенности малого размера. Каждый

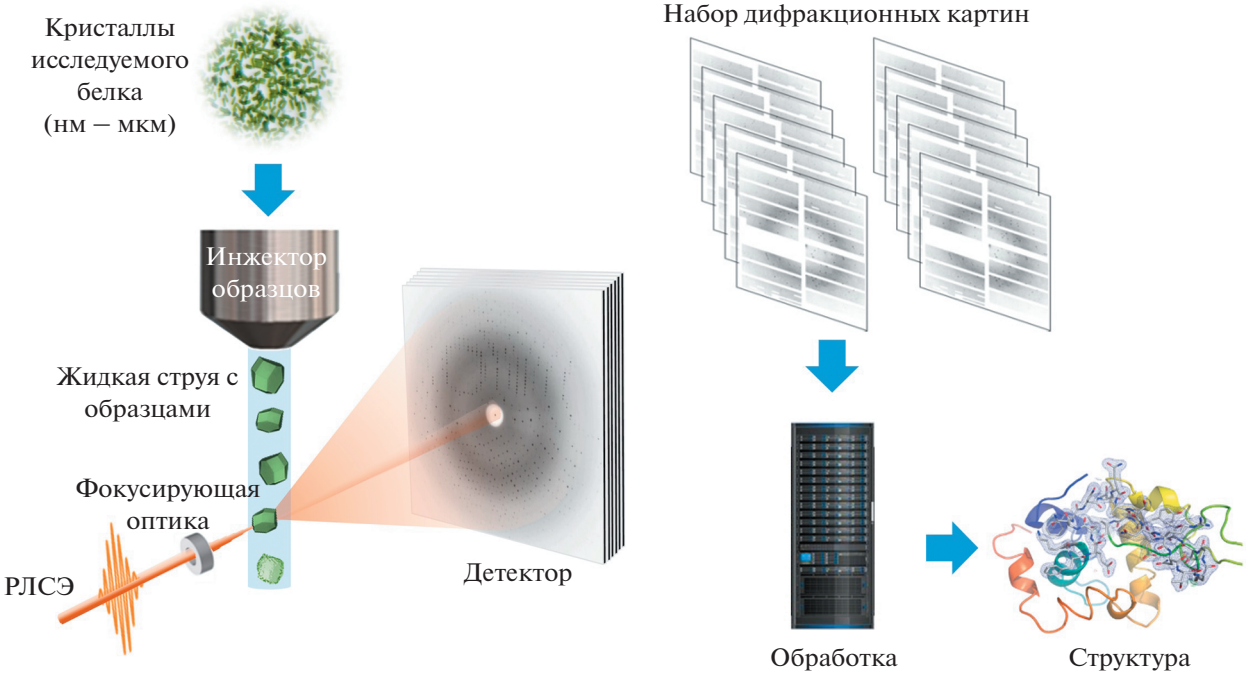


Рис. 21. Метод последовательной рентгеновской кристаллографии. Серия кристаллитов инжектируется в фокус рентгеновского пучка в произвольной ориентации. Импульс рентгеновского лазера рассеивается на образце и формирует дифракционную картину до разрушения образца. Обработка изображений проводится стандартными методами белковой кристаллографии.

пришедший импульс приводит к кулоновскому взрыву, испаряя исследуемый образец. При этом благодаря ультракороткой длительности рентгеновского импульса рассеяние происходит до разрушения образца и позволяет получить статические дифракционные изображения даже от “испаряющихся” в рентгеновском пучке образцов [72, 73].

Метод когерентной дифракционной визуализации одиночных частиц предназначен для восстановления 3D-структуры биологических микро- и наноразмерных образцов в некристаллической фазе. Как и в методе SFX, исследуемые наночастицы последовательно в произвольной ориентации доставляются в пучок рентгеновского лазера. Анализ серий картин рассеяния когерентного импульса рентгеновского лазера, основанный на восстановлении фаз рассеянного рентгеновского излучения [74–77], позволяет реконструировать 3D-структуру неупорядоченных частиц с атомным или близким к атомному разрешением (рис. 22) [78]. Для белков, вирусов и других макромолекул этот метод решения структуры полностью исключает один из самых сложных и непредсказуемых этапов структурной биологии – получения макромолекулярного кристалла [79]. В настоящее время это единственный подход к решению структуры одиночных молекул белков и вирусов с применением рентгеновского излучения.

Для микроскопических кристаллитов и наночастиц, используемых на станции SPB/SFX, требуется особая техника их доставки, которая осуществляется с использованием специальных систем инжекции образцов. В экспериментах по структурной кристаллографии в рентгеновский пучок вводится поток мелких кристаллов в струе жидкости диаметром несколько микрометров [80]. Для когерентной дифракционной визуализации применяются методы аэрозоля и электроспрея (рис. 23) [81], которые позволяют изолировать образец от любой окружающей его жидкости для уменьшения фонового рассеяния. Система доставки образцов на станции SPB/SFX обеспечивает полную совместимость и может быть использована на других станциях рентгеновского лазера.

Полный цикл исследования структуры белков методом SFX выполнен в ряде работ на примере кристаллов с хорошо известной структурой лизоцима, β-лактамазы CTX-M-14, а также смеси неизвестных кристаллов *Canavalia ensiformis*, определенных как конканавалин A и B [82–84].

На рис. 24 а приведен пример полученной структуры β-лактамазы CTX-M-14. Образцы имели размеры 3–8 мкм. Всего было собрано около 3 млн изображений, из которых с помощью программы Cheetan [85] были отобраны и проиндексированы 12474 изображения, содержащие по-

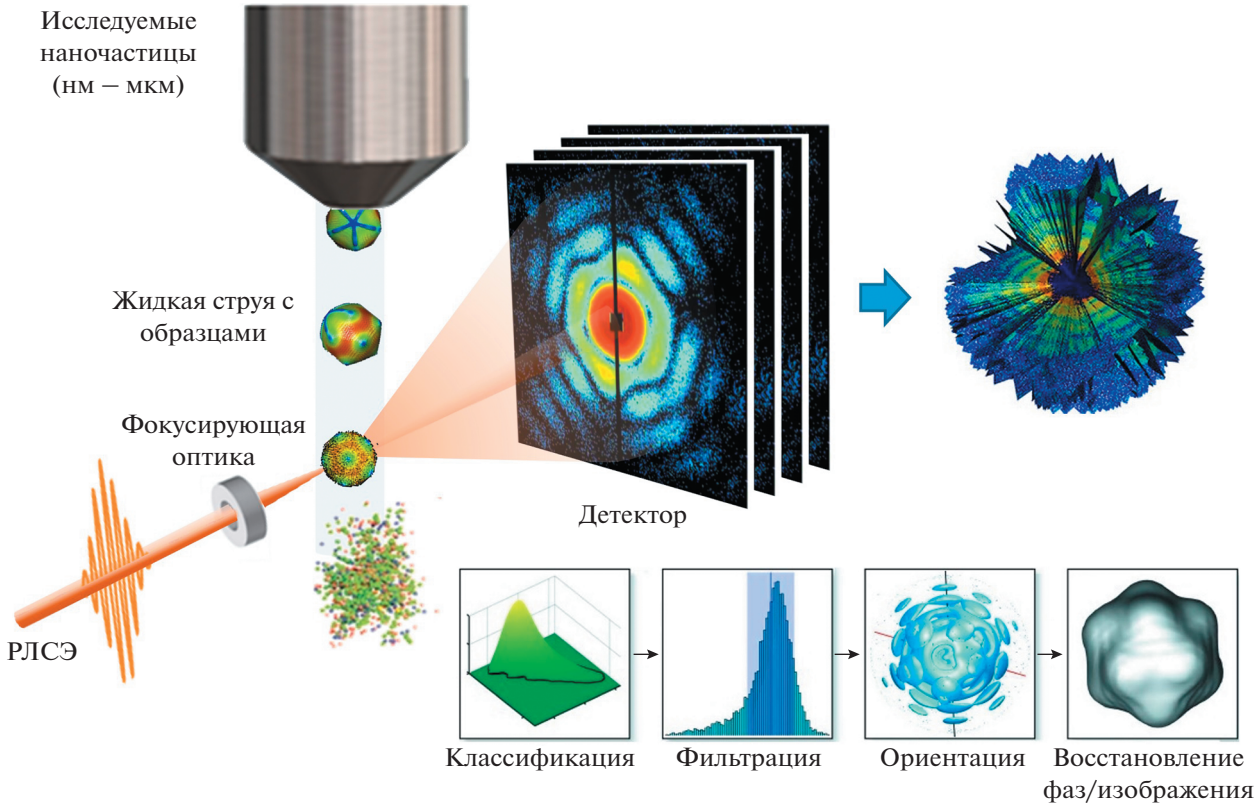


Рис. 22. Метод когерентной дифракционной визуализации одиночных частиц. Серия частиц инжектируется в фокус рентгеновского пучка в произвольной ориентации. Обработка изображений включает в себя классификацию и фильтрацию по интенсивности и качеству дифракционных картин, ориентацию, процедуру восстановления фаз, томографическое восстановление 3D-структуры.

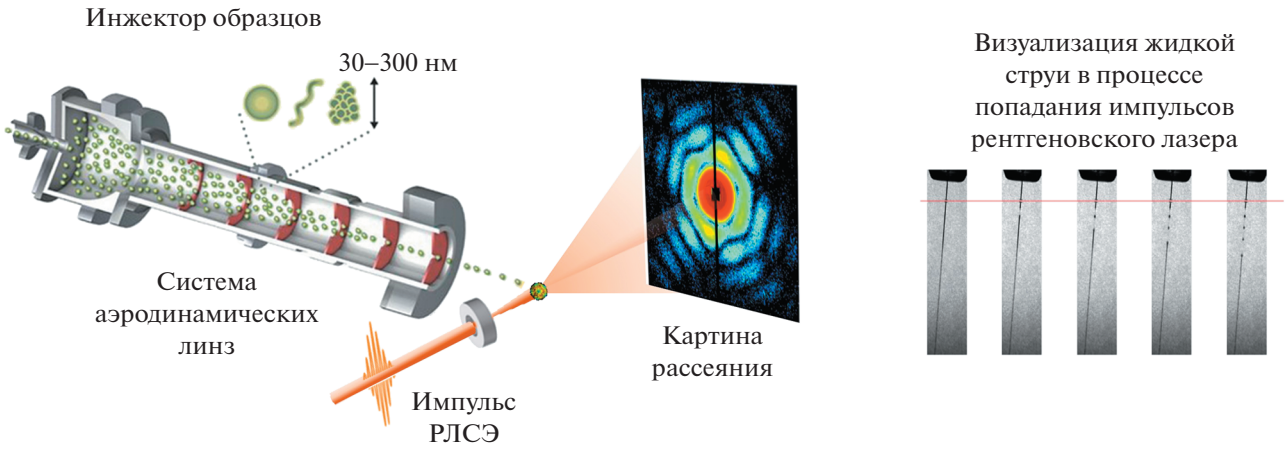


Рис. 23. Схема инжектора для доставки наночастиц методом жидкой струи, аэрозоля или электроспрея. Возможна эффективная доставка частиц диаметром от 30 до 3000 нм. Растворы частиц или аэрозоли, подаваемые через комплект аэродинамических линз с дифференциальной накачкой, преобразуются в поток одиночных частиц, который направляется в область взаимодействия с рентгеновскими лучами. Метод позволяет изолировать образец от любой окружающей жидкости, устраняя рассеяние средой доставки, которое подавляет слабый сигнал рассеяния образца.

лезные данные, в результате определена структура с разрешением 1.7 Å [86].

В целом при размере кристаллов до 20 мкм разрешение полученных структур составило от 2.2 до 1.7 Å (рис. 24). Длина волны в экспериментах составляла 0.7–0.9 Å, частота импульсов рентгеновского лазера – от 150 Гц до 1 мГц, энергия в импульсе – до 1.05 мДж. Существенных различий

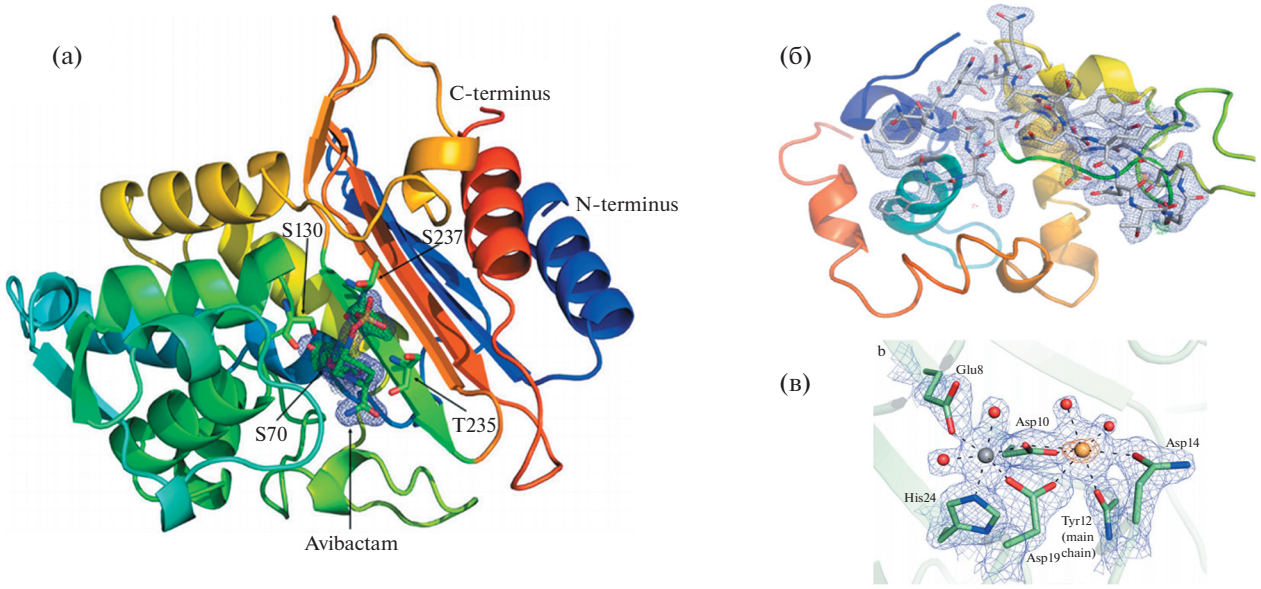


Рис. 24. Структуры белковых макромолекул, определенные с применением методов последовательной рентгеновской кристаллографии в мегагерцовом режиме: а – β-лактамаза CTX-M-14 (1.7 Å), б – лизоцим (1.8 Å), в – распределение электронной плотности конкавалина A (2.2 Å).

в качестве структурных данных, полученных методом SFX по сравнению с традиционной белковой кристаллографией, не обнаружено. Максимальное разрешение составляет 1.7 Å ввиду геометрических ограничений (размер детектора и расстояние до него от образца).

В работах дан ответ на главный вопрос – частота и сверхвысокая яркость импульсов лазера не приводят к нежелательным структурным изменениям из-за радиационного повреждения и не влияют на качество данных, что было теоретически предсказано в [73].

Эти результаты открывают долгожданные экспериментальные возможности изучения структуры мембранных белков. В [87] сообщается о первом эксперименте SFX по изучению одного из крупнейших мембранных белковых комплексов фотосистема-1 (**ФС1**, молекулярная масса > 1 МДа, содержит 36 белковых субъединиц и 381 кофактор), выполняющего роль солнечного биопреобразователя энергии в процессе кислородного фотосинтеза. В экспериментах успешно зарегистрированы дифракционные изображения от серий кристаллов ФС1 размером $5 \times 5 \times 15$ мкм^3, и на их основе определена структура комплекса с разрешением 2.9 Å (рис. 25).

Возможность проводить измерения при комнатной температуре выгодно отличает метод последовательной кристаллографии от низкотемпературных экспериментов на источниках СИ. Информация о структуре белков, полученная при комнатной температуре, более актуальна с биологической точки зрения, кроме того, высокое временное разрешение, доступное в экспериментах с применением РЛСЭ, позволяет изучать динамику белковых макромолекул. В режиме накачки–зондирования методы последовательной рентгеновской кристаллографии позволяют исследовать кратковременные, оптически возбужденные состояния или переходные состояния при прохождении конформационных изменений.

Первые исследования структурной динамики белковых молекул на станции SPB/SFX представлены в [88]. На примере фотоактивного желтого белка (**ФЖБ**) продемонстрированы возможности станции для изучения кинетики биологических реакций в сверхбыстрых временных масштабах. На рис. 26 схематично представлены фотоцикл ФЖБ и экспериментально установленная молекулярная динамика хромофорсвязывающей области при его фотовозбуждении. Хромофор в белке поглощает синий свет и переключается с прямой (Trans) конформации на изогнутую (Cis) в течение пикосекунд. Это конформационное изменение активирует другие сенсорные белки в бактерии, контролирующие направление, в котором плавает бактерия. Наконец, хромофор примерно за полсекунды возвращается к прямой конформации, готовый воспринимать еще один синий фотон.

Изучение сверхбыстрой структурной динамики фотоактивных белков представляет значительный интерес для использования в оптически контролируемых биологических реакциях. Анализ и кинетическая интерпретация данных SFX позволяют подробно рассмотреть структурные меха-

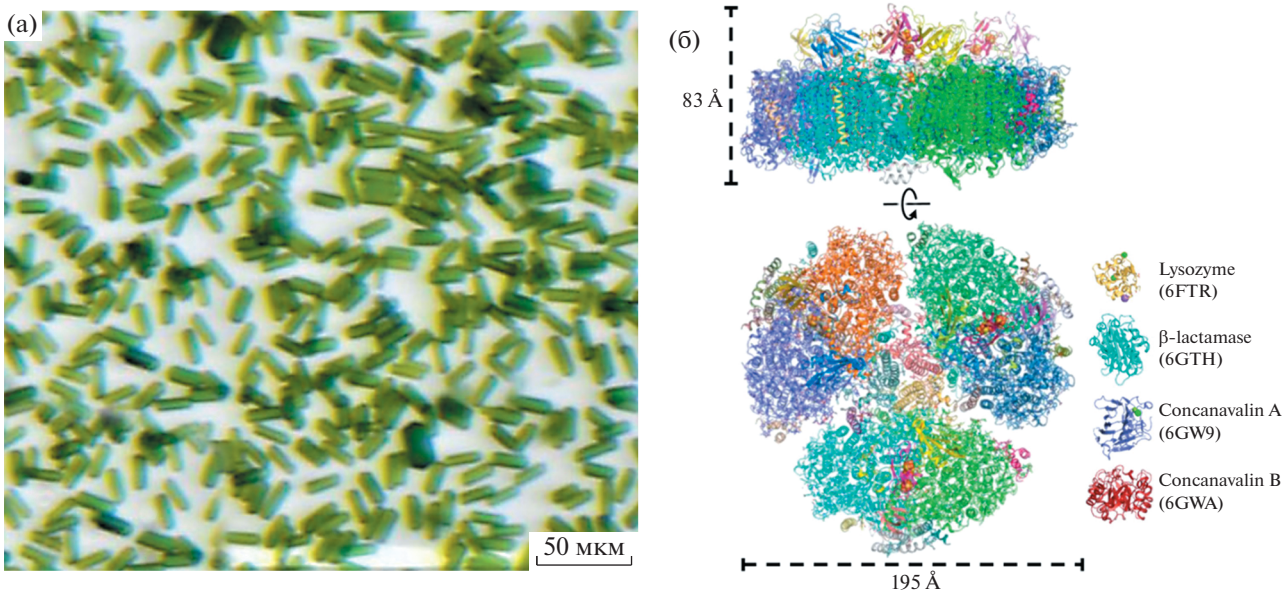


Рис. 25. Кристаллы белка фотосистема-1 (ФС1) (а). Структура тримера ФС1 (2.9 Å), содержащего 36 белковых субъединиц и 381 кофактор (показана для сравнения в масштабе с ранее решенными структурами) (б). Для тримера PSI показаны виды из плоскости мембраны (вверху) и нормали к мембране (внизу). Белковые субъединицы окрашены индивидуально.

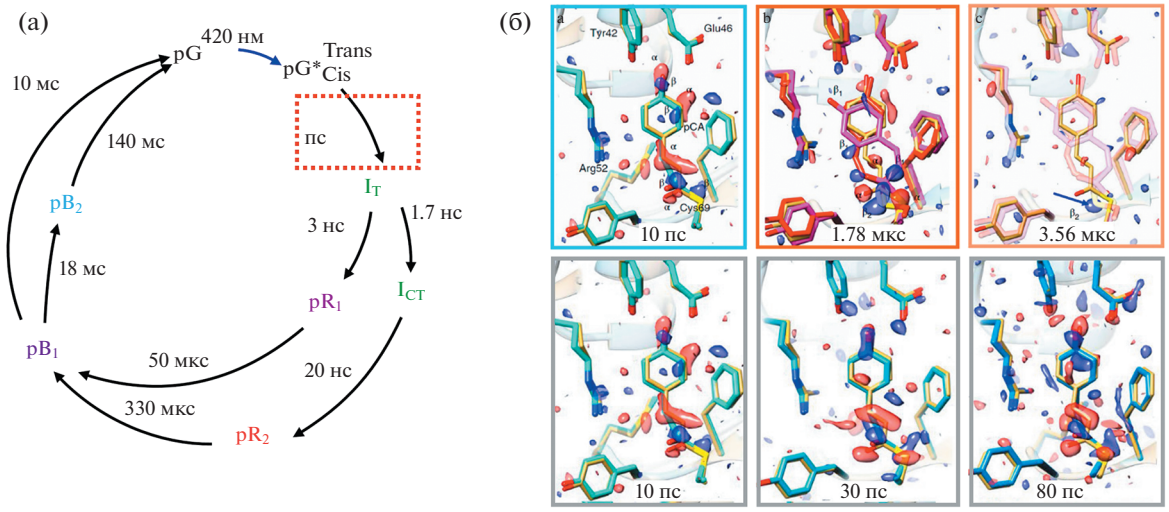


Рис. 26. Фотоцикл фотоактивного желтого белка. Выделена область, где существуют ранее неисследованные структурные состояния (а). Структурные изменения в хромофоре ФЖБ (10 пс–3 мкс) – разностные карты электронной плотности (б).

низмы передачи сигналов в белках, связанных с определенными биологическими функциями.

Когерентная дифракционная визуализация отдельных частиц – активно развивающийся метод [89], имеющий значительный потенциал, связанный с возможностью определения структуры нанообъектов без дополнительной кристаллизации.

Достижение атомного или близкого к атомному разрешения для образцов размером несколько десятков нанометров требует разработки интеллектуальных алгоритмов реконструкции изображений (включая верификацию, анализ конформа-

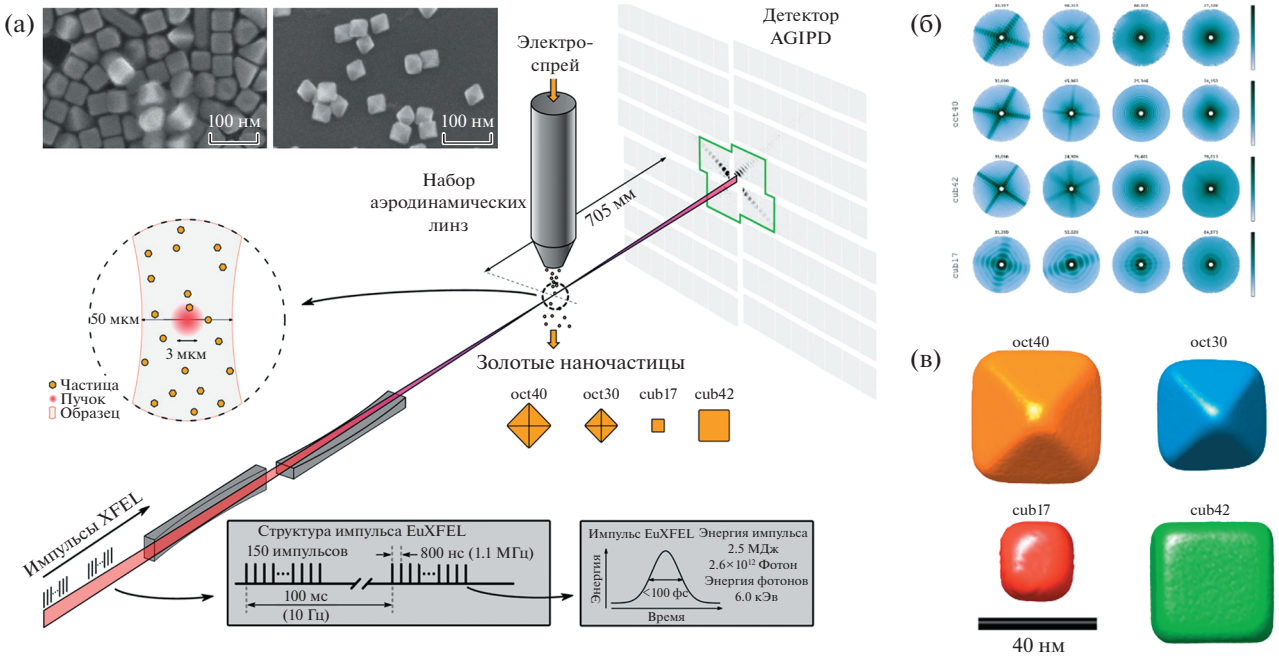


Рис. 27. Схема эксперимента. Импульсы РЛСЭ сфокусированы в пучок 3 × 3 мкм^2, выделена центральная область детектора AGIPD, используемая для структурной сортировки. СЭМ-изображения образцов cub42 и oct30 (верхняя вставка), временная структура импульсов РЛСЭ (нижняя вставка) (а). Примеры реконструированных дифракционных 2D-изображений. Цифры показывают количество дифракционных картин для построения изображения. Первые два столбца паттернов выбраны для дальнейшей обработки. Третий столбец – дифракция от округлых/сферических частиц, за исключением случая cub17, где модель показывает дифракцию от димера. Четвертый столбец – некоторые низкоконтрастные модели, полученные путем усреднения паттернов из разнообразного набора частиц. Разрешение при больших углах – 3.3 нм (б). Изоповерхностные графики электронной плотности, полученные в результате восстановления фаз (в).

ций и неоднородностей), устранения геометрических и приборных ограничений, минимизации фона рассеяния, специальной подготовки и доставки образцов [90].

Преодоление ряда методических ограничений в [91] позволило обеспечить сбор достаточно высококачественных дифракционных картин для тестовых образцов наночастиц золота размером 15–35 нм. В процессе 3D-реконструкций достигнуто разрешение выше 3 нм (рис. 27). Применение электроспрея для доставки образцов значительно улучшило статистику попадания лазерного импульса в образец, снизило неоднородности образцов и фоновое рассеяние.

На рис. 28 показана шкала разрешений для различных нанобъектов (преимущественно вирусов), демонстрирующая прогресс в достижении атомарного разрешения методами когерентной дифракционной визуализации отдельных частиц за последние 10 лет [92–94].

Подготовка образцов для экспериментов по исследованию одиночных наночастиц представляет отдельную методическую задачу, качество образца критично для успешного проведения эксперимента. В [95] проведен эксперимент по исследованию молекулы вируса клещевого энцефалита (**ВКЭ**) методом 3D-визуализации SPB. Это первый российский образец, исследованный данным методом на XFEL. Метод подготовки образцов, обеспечивающий их чистоту и гомогенность, был предварительно отработан в НИЦ “Курчатовский институт” с применением контроля образцов с помощью криоэлектронной микроскопии. В результате эксперимента собран набор дифракционных данных с образца ВКЭ (рис. 29), данные в процессе обработки. Исследование продемонстрировало возможность получать дифракционные картины от частиц размером до 50 нм.

5.3. Станция “Визуализация и динамика материалов” (Materials imaging and dynamics, MID)

Станция “Визуализация и динамика материалов” представляет собой основной инструмент проведения исследований в области структурного материаловедения – изучение структуры, структурной динамики и свойств широкого спектра материалов от твердых тел и жидкостей до полимеров, коллоидов и объектов биологической природы [96]. Области практического применения –

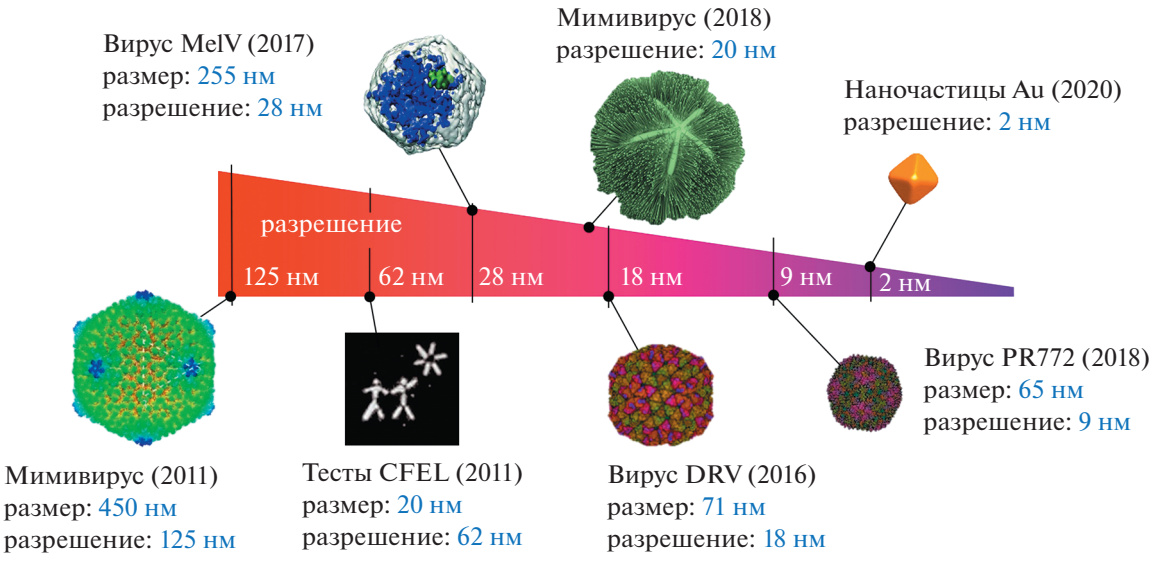


Рис. 28. Шкала пространственных разрешений для различных нанообъектов от крупных вирусов до тестовых наночастиц, структура которых получена с применением когерентной дифракционной визуализации.

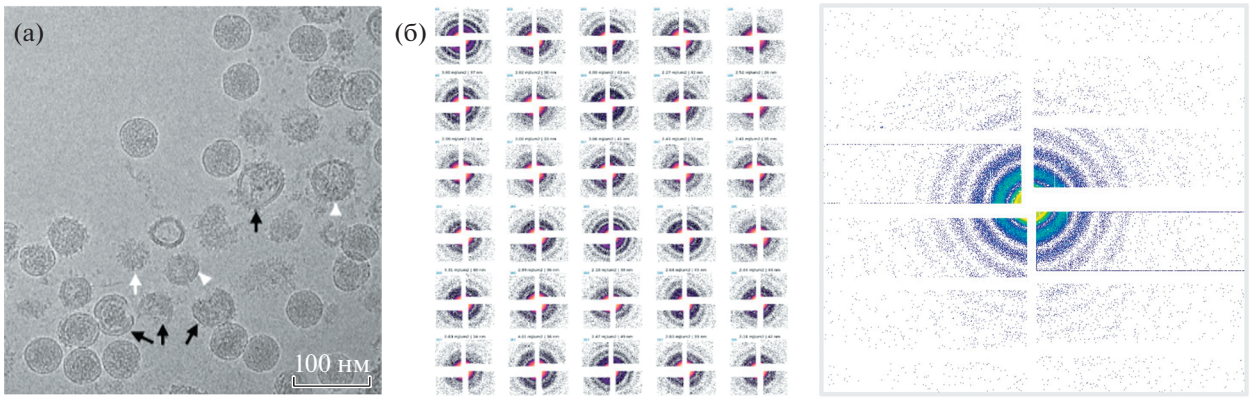


Рис. 29. Изображения вируса клещевого энцефалита (криоэлектронная микроскопия) (а). Набор дифракционных картин от одиночных, предварительно изолированных молекул ВКЭ (б). Образцы инактивированных вирусов были получены в ФНЦ ИРИП им. М.П. Чумакова РАН.

микроэлектроника, нанобиотехнологии, медицинские технологии и многие другие области, связанные с созданием функциональных и конструкционных материалов с особыми свойствами.

Возможности РЛСЭ в сочетании с инструментальным и методическим оснащением станции открывают принципиально новые горизонты в исследовании частично упорядоченных или аморфных систем в условиях стационарных и неравновесных состояний. Доступ к атомарной структуре с высоким временным разрешением позволяет на принципиально новом уровне решать достаточно широкий круг задач: от классических фундаментальных задач по изучению механизмов самоорганизации и разрушения, формирования ближних и дальних порядков, изучения фазовых переходов, вязкоупругих процессов, сложной динамики полимеров и конформационных изменений биологических объектов до практических задач по изучению свойств поверхности твердых тел и жидкостей, границ раздела, динамики доменных границ, магнитных и электронных свойств [97–100].

Прибор MID представляет собой гибкую платформу для проведения экспериментов по рассеянию импульса рентгеновского лазера для широкого класса образцов. Основные параметры станции приведены в табл. 6, схема экспериментальной станции показана на рис. 30.

Энергия рентгеновского импульса определяется ондулятором SASE2 и настраивается в диапазоне от 5 до 25 кэВ. Конечный рентгеновский импульс формируется системой щелей, аттенюа-

Таблица 6. Параметры станции “Визуализация и динамика материалов”

Энергия фотона	5–25 кэВ (когерентный) >25 кэВ (высокоэнергетический)
Полоса пропускания	6×10^{-5}, 10^{-4} или 10^{-3} (розовый)
Поляризация	Линейная (в горизонтальной плоскости)
Длительность импульса	1–100 фс
Мощность импульса	0.5 мДж (при 10 кэВ)
Фотонов в импульсе	3×10^{11} (после монохроматора)
Размер пучка	1–200 мкм, 1 мм и опция нанофокусировки
Специальная оптика	– Два монохроматора Si(111) и Si(220) – Два трансфокатора с составными преломляющими линзами (CRL) – Линия разделения и задержки – Высокоэнергетический монохроматор Лауэ – Зеркало для рассеивания на жидкости при скользящем падении
Оборудование	– Многофункциональная камера SAXS/WAXS с горизонтальным плечом детектора – Небольшая вертикальная установка WAXS – Одноимпульсная рентгеновская диагностика – Различные детекторные системы (ASDIP, FastCCD) – Оптической лазерный источник (система накачки)

торов и двумя кремниевыми монохроматорами Si(111) и Si(220). Для фокусировки применяются два трансфокатора, управляющих составными преломляющими линзами. Дополнительно внутри экспериментальной камеры может быть установлена нанофокусирующая линза, что в совокупности позволяет сфокусировать импульс рентгеновского лазера в пятно размером до 10 нм при энергии 25 кэВ (рис. 31).

На станции установлена линия разделения и задержки (SDL, split-delay line), разделяющая одиночный рентгеновский импульс на два последовательных [101]. Интервал между импульсами регулируется в диапазоне от 0 до 800 пс с точностью до нескольких фемтосекунд. Кросс-корреляционный анализ и угловая дифференциация импульсов позволяют разделить интегрированные детектором картины рассеяния от каждого импульса. Такой режим работы станции существенно расширяет возможности по исследованию сверхбыстрой структурной динамики, в том числе в комбинации с оптической лазерной накачкой.

Многофункциональная экспериментальная камера станции (рис. 32а) представляет собой вакуумный объем, в котором поддерживаются условия умеренного вакуума до 10^{-5} мбар. Камера позволяет устанавливать различные системы доставки образцов: устройства быстрой замены твердых образцов, жидкостные ванны, аэрозольные или жидкоструйные инжекторы. Для создания нужной геометрии эксперимента, сканирования и юстировки образцы закрепляются на столе гексапода с необходимыми степенями свободы. Дополнительно могут быть установлены системы нагрева, охлаждения или приложения магнитного поля к образцу, оптического лазерного воздействия.

Основной детектор станции – быстрый детектор AGIPD 1M [102] имеет разрешение 1 мегапиксель и состоит из 16 кремниевых модулей (512 × 128 пикселей), сгруппированных в четыре независимо перемещаемых блока (рис. 32б). Размер пикселя составляет 200 мкм. Каждый пиксель оснащен собственными ячейками памяти (352 ячейки на пиксель), что обеспечивает частоту сбора кадров до 4.5 МГц в режиме высокой повторяемости импульсов рентгеновского лазера. Считывание данных из ячеек памяти происходит с частотой 10 Гц в интервале между группами импульсов рентгеновского лазера. Пиксели независимо автоматически переключаются между тремя уровнями усиления, благодаря чему достигается широкий динамический диапазон чувствительности (от единичного фотона до 10^4 фотонов при 12.4 кэВ).

На станции MID реализовано несколько методик визуализации, использующих преимущества когерентности, потока и сверхкороткой длительности рентгеновского импульса и позволяющих не только восстанавливать формы объектов, внутреннюю структуру и динамику, но и количественно изучать электронную плотность, химические связи, поля деформаций.

Когерентная дифракционная визуализация (CDI) – реконструкция формы и внутренней 3D-структуры объектов на основе измерения серии когерентных рентгеновских дифракционных изображений при различной ориентации. Использование различных доступных источников возбуждения (например, оптического лазера, импульсных магнитных установок, разделения рентгеновского импульса и линии задержки) позволяет проводить эксперименты в режиме накачки–зондирования с фемтосекундным временным разрешением. Инжектирование вместе с исследуемыми образцами эталонных наночастиц

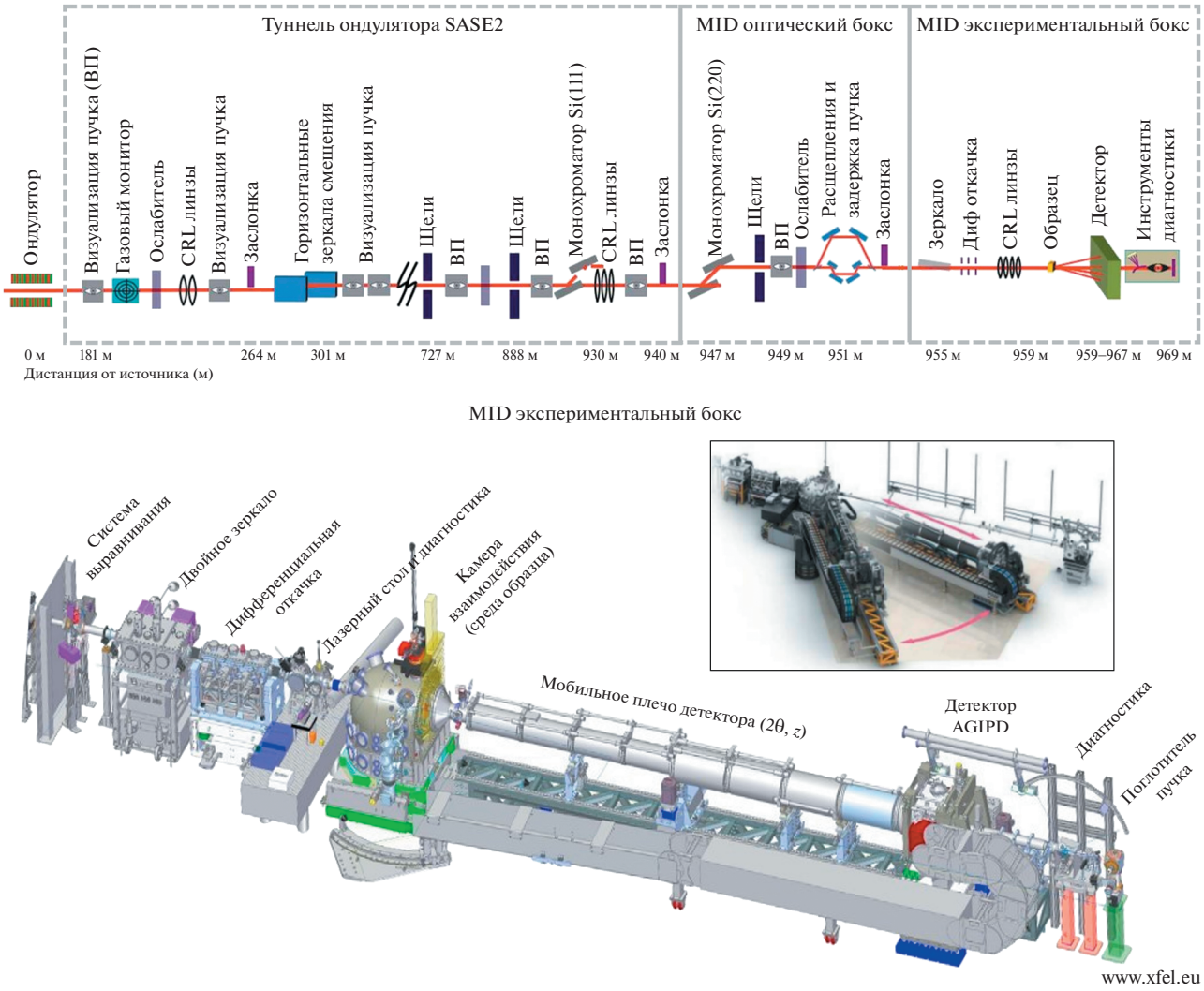


Рис. 30. Экспериментальная станция “Визуализация и динамика материалов”. Станция может работать в различных конфигурациях в зависимости от требований к полю обзора детектора, пространственному разрешению и угловому диапазону: широкого поля обзора (детектор устанавливается на расстоянии 20 см от образца и интегрируется с экспериментальной камерой); малоуглового и широкоуглового рассеяния (детектор устанавливается на подвижном плече, расстояние от образца до детектора регулируется от 3 до 8 м, угол рассеяния 2θ в диапазоне 14°–55°).

(например, наносфер золота) размером от 100 до 2 нм для создания опорного сигнала предоставляет уникальную возможность для визуализации нанообъектов с использованием голографических методов, в режиме голографии ближнего поля (в расходящемся пучке), в качестве опорного источника используется падающая на образец волна.

Рентгеновский кросс-корреляционный анализ (XCCA) – исследования структуры частично упорядоченных систем – ближнего порядка и скрытых симметрий, метастабильных стеклообразных или аморфных фаз на основе расчета угловых корреляций (кросс-корреляционной функции) рассеяния рентгеновских лучей в области малых и средних углов. Фурье-анализ полученной угловой корреляционной функции позволяет выявить тонкие структурные особенности, доминирующие симметрии и локальное упорядочение для широкого спектра функциональных и конструкционных материалов: стекловидных материалов, металлических сплавов и керамики, квази- и мезокристаллов, жидких кристаллов, коллоидов, полимеров и композитных материалов.

*Рентгеновская фотонная корреляционная спектроскопия (**XPCS**)* – изучение медленной структурной динамики материалов в условиях равновесных и неравновесных процессов: самоорганизация и рост наночастиц, диффузия, релаксация и реорганизация в объеме, на поверхности или на границах раздела (например, жидкость–жидкость и жидкость–твердое тело).

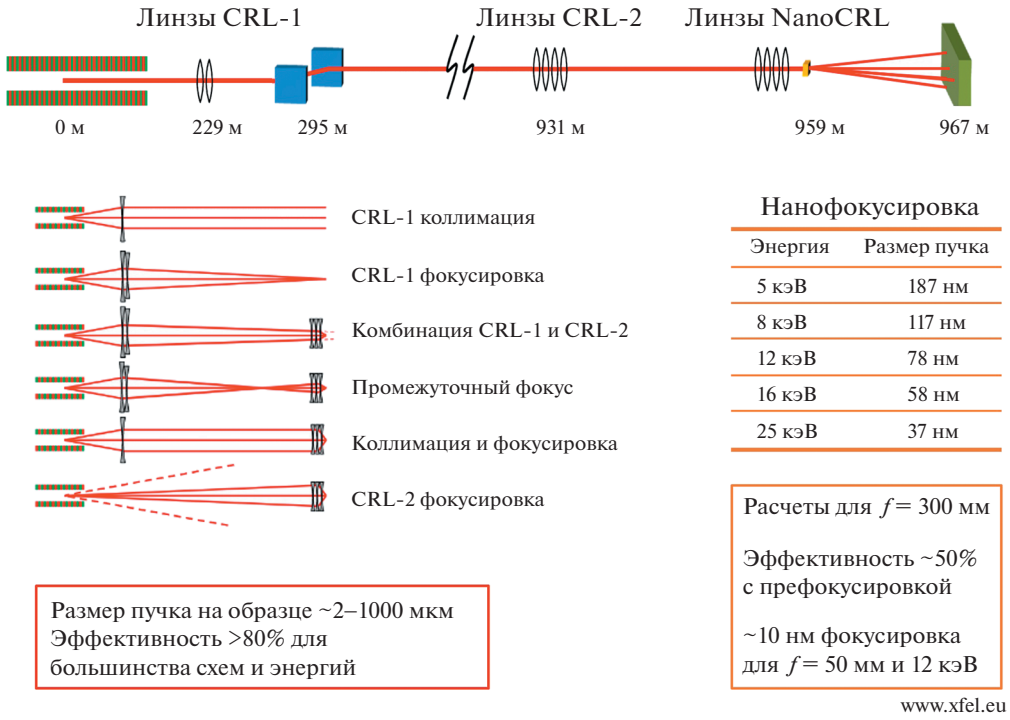


Рис. 31. Схемы фокусировки станции “Визуализация и динамика материалов”.

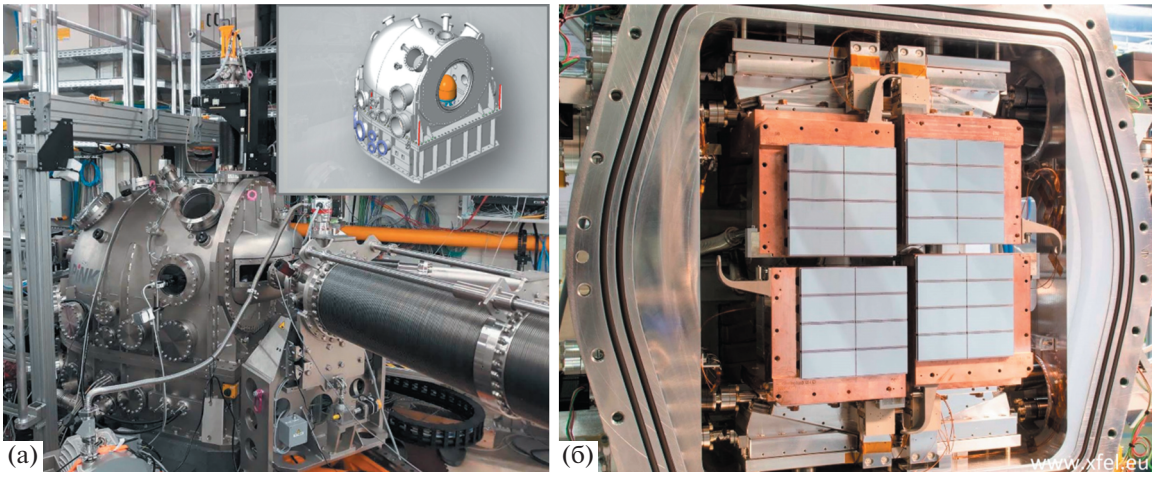


Рис. 32. Экспериментальная камера станции “Визуализации и динамика материалов” (а). ASDIP 1M – основной детектор станции MID (б).

В экспериментах XPCS измеряются флуктуации когерентных изображений во времени. Функция временной корреляции интенсивности определенных областей измеренных картин когерентного рассеяния позволяет изучать интересующие процессы в микро- или наносекундных временных масштабах.

Спектроскопия видимости рентгеновских спеклов (XSVS) – изучение динамической эволюции систем с помощью статистического анализа изменяющихся во времени когерентных дифракционных изображений. Метод расширяет временные рамки рентгеновской фотонной корреляционной спектроскопии и в сочетании с настройками линии разделения и задержки импульсов рентгеновского лазера может использоваться для достижения нано- и фемтосекундных временных масштабов.

Метод XPCS применен в [103] для изучения медленной динамики коллоидных растворов –

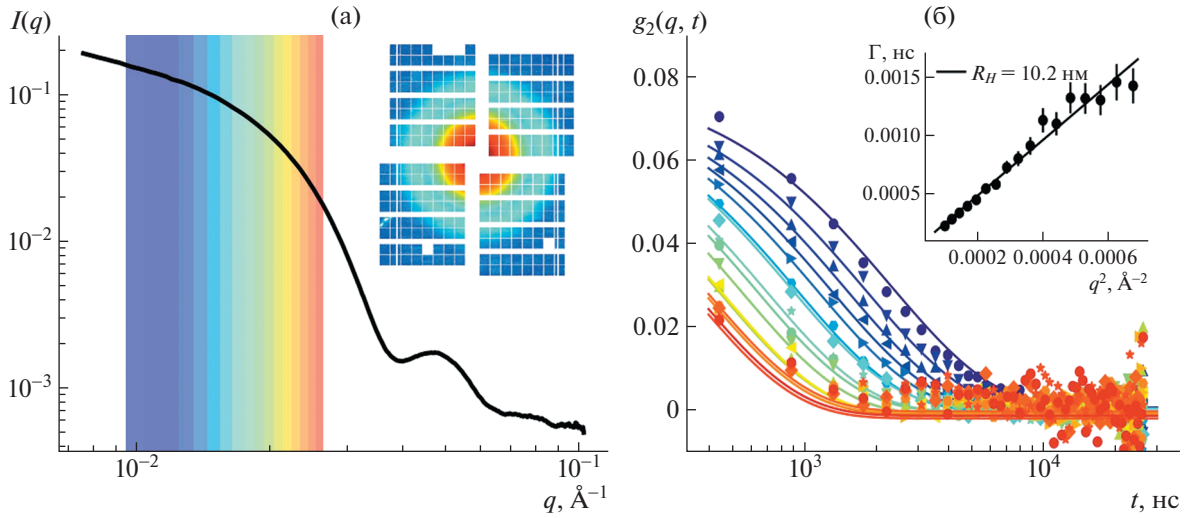


Рис. 33. Усредненные данные малоуглового рентгеновского рассеяния водного раствора наночастиц диоксида кремния. Вертикальные области указывают интервалы q, для которых рассчитываются функции автокорреляции. На вставке средняя интенсивность рассеяния для каждого пикселя AGIPD (а). Автокорреляционные функции $g2(q,t)$ наночастиц 10 нм, диспергированных в воде. На вставке скорость распада Γ в зависимости от q^2 показывает диффузионное поведение коллоидной дисперсии (б).

наночастиц диоксида кремния (R = 10 нм), диспергированных в воде.

На рис. 33а приведены экспериментальные картины малоуглового рассеяния, измеренные с использованием детектора AGIPD (расстояние образец–детектор – 7.8 м, энергии фотонов – 9 кэВ).

Полученные автокорреляционные функции (рис. 33б) иллюстрируют диффузионное поведение коллоидной системы для различных пространственных масштабов. Результаты дисперсионного соотношения хорошо описываются линейной зависимостью, в результате чего определен гидродинамический радиус – 10.2 нм.

Изучение диффузного поведения растворов белков имеет важное значение для исследования начальной стадии кристаллизации белков, характерной образованием олигомеров определенного типа – строительных блоков, из которых впоследствии формируется белковый кристалл [104–109]. Фотонная корреляционная спектроскопия с применением РЛСЭ отрывает новые возможности для исследования начальных стадий кристаллизации и развития методов прогнозируемого роста белковых кристаллов.

Возможности станции по изучению быстрых нестационарных процессов продемонстрированы в ряде работ [110–113].

Быстрая наносекундная динамика кавитационных процессов в водной среде, индуцированных мощным сфокусированным импульсом оптического лазера, исследована в [110, 111]. Кавитационные процессы сопровождаются широким спектром быстропротекающих нелинейных эффектов: высоким сжатием, нагревом и испарением среды, образованием пузырьков газа, распространением ударной волны. Помимо фундаментальных аспектов неравновесной физики понимание динамики развития кавитационных процессов важно для сонохимии, ультразвуковой очистки, предотвращения коррозии, а также для целого ряда медицинских процедур, например для операций по удалению катаракты, лазерной терапии, адресной доставке лекарств.

Исследования проводились в режиме накачки–зондирования с применением рентгеновской голографии ближнего поля [112]. Схема и результаты эксперимента – наносекундная динамика образования кавитационного пузыря и распространения ударной волны, показаны на рис. 34.

Фазовый сдвиг (контраст), фиксируемый рентгеновской голограммой, напрямую связан с распределением электронной плотности исследуемого объекта. Чувствительность к электронной плотности позволила восстановить распределение давления и плотности на внутренней и внешней границах раздела (газ/ударная волна и ударная волна/равновесная вода) в наносекундном масштабе, что недоступно другим методам (оптической и ультразвуковой диагностики). Радиальная плотность (рис. 32в) пузырька показывает постепенный переход от газа к сжатой воде в ударной волне. Для данного эксперимента максимальная плотность в ударной волне составила ~1.3 г/см^3, что соответствует давлению ~1.7 ГПа.

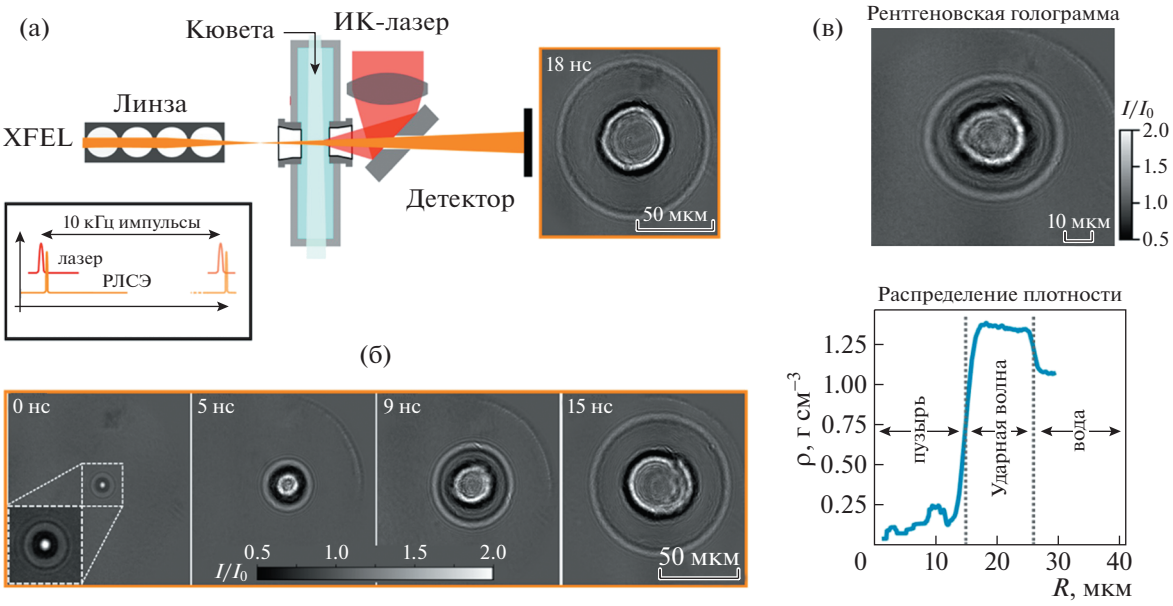


Рис. 34. Схема эксперимента: кювета с водой помещается в расходящийся импульс рентгеновского лазера. ИК-лазер фокусируется в кювету для создания кавитационного пузырька внутри воды. Рентгеновский импульс сканирует пузырек с определенной задержкой после лазерного импульса. Рентгеновская голограмма детектируется сцинтилляционным CMOS-детектором (а). Голограммы кавитационных пузырьков для различных временных задержек (б). Рентгеновская голограмма с задержкой 10 нс и вычисленное распределение плотности среды в области кавитационного пузырька (в).

С применением аналогичной техники голографической флэш-визуализации в [113] проведены исследования динамики дестабилизации и лазерного кавитационного взрыва жидкой струи в системах доставки образцов. Разрыв струи демонстрирует богатую динамику каплеобразования при нарушении ламинарного потока из-за капиллярных сил и динамических неустойчивостей (рис. 35а). Кавитационный взрыв струи при воздействии мощного лазерного импульса приводит к распространению ударной волны вверх по струе жидкости, что может привести к повреждению других образцов (рис. 35б).

Исследования имеют важное значение для повышения скорости сбора данных и выбора оптимальных режимов доставки образцов в экспериментах с учетом таких параметров, как скорость потока жидкой струи, частота и мощность импульсов рентгеновского или оптического лазеров.

5.4. Станция "Материя с высокой плотностью энергии" (High-Energy Density matter, HED)

Станция "Материя с высокой плотностью энергии" – основной инструмент проведения исследований экстремального состояния вещества – состояния с аномально высокой плотностью энергии в условиях сверхвысоких давлений, температуры, электрического и магнитного поля.

Такие состояния характеризуются плотностью энергии, превышающей 10^{11} ГДж/м^3, или эквивалентным давлением выше 1 Мбар, вещества при этом испытывают существенное сжатие и представляют собой ионизированные системы с температурой от одного до нескольких электронвольт, химические связи исчезают, кардинально меняются свойства.

Научные приложения связаны с целым рядом фундаментальных и прикладных задач: астрофизические явления – изучение материи и процессов внутри экзопланет и планет-газовых гигантов, солнечной и звездной материи, изучение экзотического состояния вещества: плазма высокой плотности, полые ионы. Важное практическое значение представляют исследования структурных фазовых переходов твердых тел и получение новых фаз вещества в условиях экстремального давления и температур, например поиск высокотемпературных сверхпроводников [114–116], осуществление инерциального термоядерного синтеза [117], лазерное ускорение заряженных частиц, а также генерация рентгеновского излучения и получение аттосекундных импульсов [118].

Комбинация мощных оптических лазеров и РЛСЭ предоставляет уникальные возможности для изучения переходного поведения вещества в экстремальных условиях. Импульсный оптический лазерный нагрев позволяет получить доступ

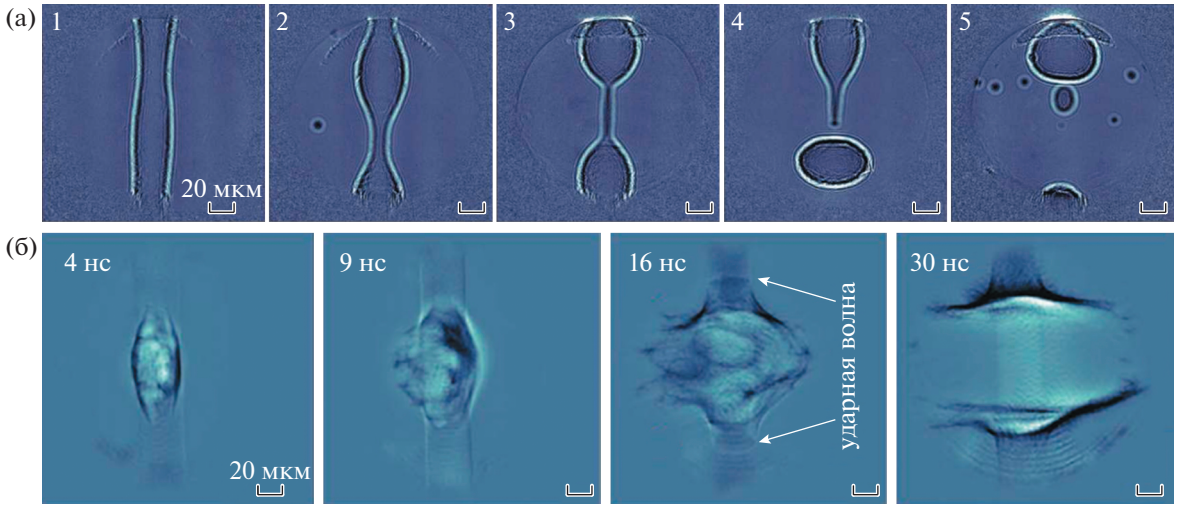


Рис. 35. Изображение внутренней динамики водяной струи в области разрушения (а). Динамика кавитационного взрыва жидкой струи при воздействии оптическим лазером. Стрелками показана ударная волна, распространяющаяся вдоль струи в противоположных направлениях (б).

к широкому диапазону состояний с плотностью энергии от твердых тел при комнатной температуре до плазмы с температурой в сотни миллионов кельвинов (>10 кэВ) при увеличении плотности твердого вещества на три и более порядка.

Станция объединяет полный набор рентгеновских исследовательских инструментов в области структурной диагностики материалов (дифракция, спектроскопия и рассеяние) с возможностями высокоэнергетических оптических лазеров, мощных импульсных магнитов или сфокусированного пучка рентгеновского лазера по созданию сверхвысоких давлений и температур, электрических и магнитных полей гигантской напряженности [119–122].

Основные параметры станции приведены в табл. 7, схема экспериментальной станции показана на рис. 36. Рабочий диапазон рентгеновского излучения на станции составляет 5–25 кэВ при номинальной полосе пропускания $\Delta E/E \sim 10^{-3}$. Полоса пропускания 10^{-4} достигается с помощью четырехкратного монохроматора Si(111), монохроматор высокого разрешения Si(533) обеспечивает полосу пропускания $\sim 5 \times 10^{-6}$ при энергии фотонов 7.5 кэВ. Для фокусировки применяются четыре набора преломляющих бериллиевых линз, что позволяет фокусировать рентгеновские лучи до 1–200 мкм.

Линия разделения и задержки (split-delay line, SDL) [123, 124] позволяет получить два последовательных импульса рентгеновского лазера с независимо настраиваемыми интенсивностями и максимальной задержкой 2 пс (при 20 кэВ) и 23 пс (при 5 кэВ). Использование двух последовательных импульсов рентгеновского лазера с регулируемой задержкой расширяет возможности экспериментов с временным разрешением, в том числе в режиме накачки–зондирования. Также в режи-

Таблица 7. Параметры станции “Материя с высокой плотностью энергии”

Энергия фотона	5–20 кэВ (3–25 кэВ)
Полоса пропускания $\Delta\lambda/\lambda$	10^{-3} (источник SASE ЛСЭ) 10^{-4} (Si (111) монохроматор) 10^{-6} (при 7.49 кэВ, Si(533) монохроматор)
Поляризация	Линейная (в горизонтальной плоскости)
Длительность импульса	2–100 фс
Мощность импульса	1 мДж (при 10 кэВ)
Фотонов в импульсе	3×10^{11} (после монохроматора)
Размер пучка	сфокусированный – <1 мкм, коллимированный – 1 мм
Специальная оптика	– Стандартный четырехканальный Si(111)-монохроматор – Монохроматор высокого разрешения на 7.49 кэВ
Оборудование	– DIPOLE-100X высокоэнергетический (515 нм, 100 Дж, 1–15 нс) лазер – Multi-100 – высокоинтенсивный (800 нм, 4–10 Дж, 30 фс) – Оптической лазерный источник накачки (1–100 мДж, 15 фс–1пс) – Алмазные наковальни – Импульсные магниты (до 60 Т–0.6 мс)

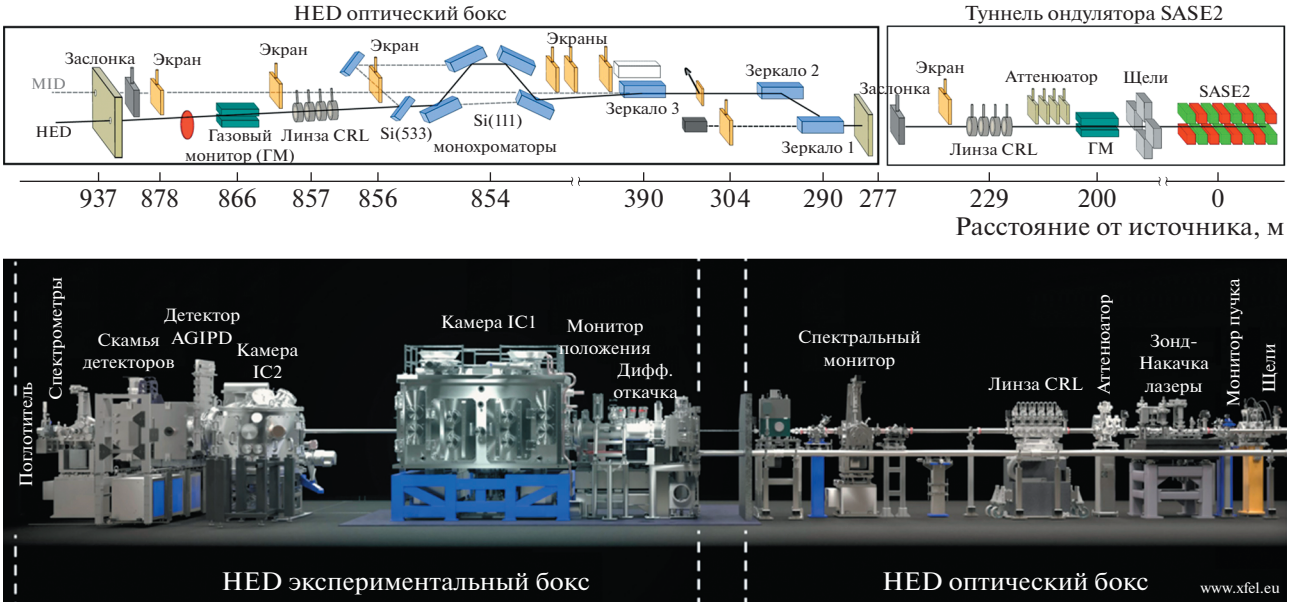


Рис. 36. Экспериментальная станция “Материя с высокой плотностью энергии”.

ме разделения импульсов первый импульс рентгеновского лазера может быть использован для накачки среды, а второй – в качестве зондирующего для измерений структурных параметров исследуемой системы.

Станция имеет две экспериментальных камеры (рис. 36). Большая вакуумная камера (IC1) с рабочим давлением ~10^{-4} мбар позволяет реализовать несколько экспериментальных конфигураций для дифракции, спектроскопии и неупругого рассеяния рентгеновских лучей. Малая камера (IC2) предназначена для экспериментов с алмазными наковальнями и экспериментов по динамическому лазерному сжатию. Малая камера также позволяет разместить гониометр с импульсной магнитной катушкой и криогенной средой для образцов.

Станция оснащена несколькими мощными лазерными установками для создания условий высокой плотности энергии в веществе. Высокоэнергетический наносекундный лазер с диодной накачкой DiPOLE-100X обеспечивает энергию импульса до 80 Дж на длине волны 515 нм при длительности импульса 2–15 нс и максимальной повторяемости 10 Гц. Его основное назначение – эксперименты по ударному и изоэнтропическому лазерному сжатию.

Лазер высокой интенсивности Multi-100 TW Ti : Sapphire обеспечивает энергию импульса 4–10 Дж на длине волны 800 нм в режиме ультракоротких импульсов длительностью менее 25 фс при частоте повторения 10 Гц. Микронная фокусировка (~мкм^2) позволяет достичь плотности мощности лазерного излучения на образце ~10^{20} Вт/см^2. Этот лазер будет в первую очередь использоваться для экспериментов по взаимодействию релятивистских электронов с веществом.

Также доступны стандартные лазеры накачка–зондирование, применяемые на XFEL с длинами волн 800 и 1030 нм, энергией в импульсе 1–100 мДж и длительностью 15 фс–1 пс.

Для динамического сжатия применяются ячейки с алмазными наковальнями, импульсные магниты позволяют создавать магнитные поля до 60 Тл. Наращивание поля занимает 0.6 мс, что хорошо согласуется с частотой импульсов рентгеновского лазера 4.5 МГц.

На станции HED предусмотрены различные рентгеновские методы для исследования атомной и электронной структуры материалов:

– дифракция рентгеновских лучей (XRD);

– малоугловое рассеяние рентгеновских лучей (SAXS);

– спектроскопия поглощения рентгеновских лучей (XAS);

– неупругое рассеяние рентгеновских лучей (IXS);

– рентгеновская эмиссионная спектроскопия (XES);

– рентгеновская визуализация (XI).

Научная программа станции включает в себя следующие задачи.

Твердое вещество в состояниях экстремального давления и плотности – изучение новых фаз с применением статического сжатия (например, ячеек с алмазными наковальнями), применение

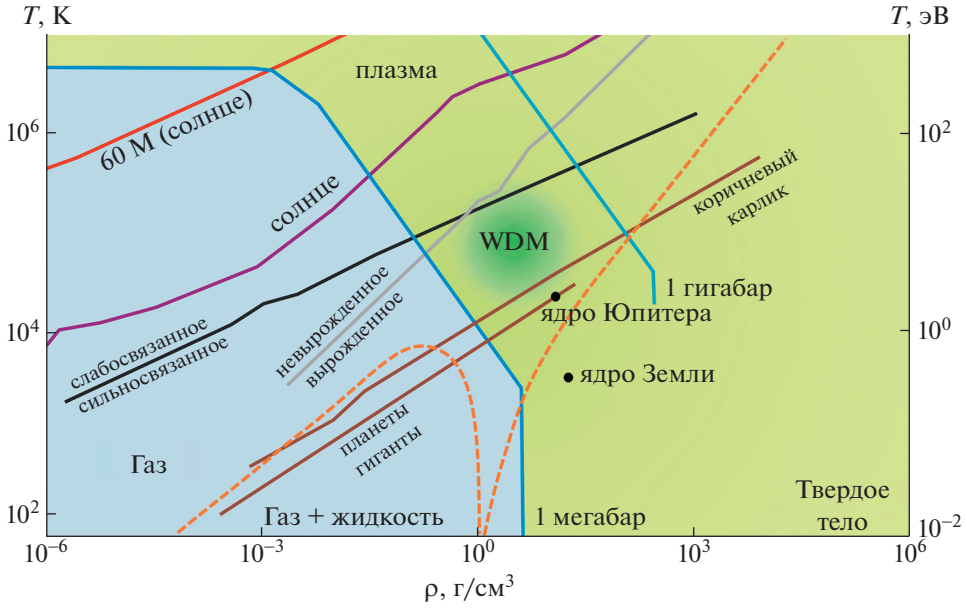


Рис. 37. Фазовая диаграмма плотности и состояния вещества. Правая-верхняя область – высокая плотность энергии (HED), центральная – горячая плотная материя (WDM), левая-нижняя – обычное состояние. WDM считается подмножеством HED с плотностями, близкими к твердому веществу, и температурой около 1 эВ. Ниже черной линии – сильносвязанное состояние (кулоновская энергия превышает тепловую).

импульсного оптического лазерного нагрева для достижения высоких давлений и температур за пределами возможностей статического сжатия.

Твердые тела в сильных импульсных магнитных полях – изучение структурных изменений, вызванных магнитным полем. Благодаря очень высокой повторяемости импульсов рентгеновского лазера (220 нс) можно проследить реакцию образца на изменение импульсного магнитного поля (максимум 50–60 Тл, время нарастания ~мс).

Изохорический нагрев с использованием XFEL – создание с помощью рентгеновского лазера и изучение физических свойств горячей плотной материи (WDM, warm dence matter), которая определяется как частично вырожденная, ионно-коррелированная плазма твердой плотности (рис. 37). Короткая длительность и яркие импульсы ЛСЭ позволяют создавать однородно нагретые состояния плазмы твердой плотности до того, как произойдет гидродинамическое расширение.

Физика плазмы в режиме релятивистских электронов – изучение сложной динамики релятивистских электронных пучков высокой плотности внутри твердых тел и связанной с ними ионизации и структуры поля с использованием короткоимпульсной (~30 фс) лазерной системы класса 100 ТВт для создания релятивистских электронных пучков.

Квантовые состояния, генерируемые сверхмощными лазерными импульсами – изучение нелинейных квантовых эффектов в условиях сверхсильных электрических и магнитных полей, например двулучепреломление вакуума, возмущенное оптическим лазером. Для этого требуется лазер сверхпетаваттного класса, оснащение станции которым планируется в течение нескольких лет после начала эксплуатации.

В настоящее время на станции проводятся работы, имеющие преимущественно методический характер, связанные с настройкой экспериментальных схем, спектрометров и детекторов [125–127], определением оптимальных режимов совместной работы РЛСЭ, оптических лазеров и детекторов.

В одной из первых исследовательских работ [128], выполненных на станции и демонстрирующих ее экспериментальные возможности, с применением алмазных наковален наблюдался сверхбыстрый синтез ε-Fe_3N_{1+x} в ячейке из Fe и N_2 под давлением, индуцированный излучением РЛСЭ в режиме *in situ*. Схема эксперимента показана на рис. 38. Образец облучали серией импульсов при давлении 5 ГПа с частотой 2.25 мГц, расчетная температура образца во время задержки была выше 1400 K, что подтверждается преобразованием α- в γ-железо (рис. 39), при этом железо и азот однородно прореагировали по всей области взаимодействия с образованием $Fe_3N_{1.33}$. Также показана возможность исследования временной зависимости реакций в условиях высокого давления с использованием временной структуры источника.

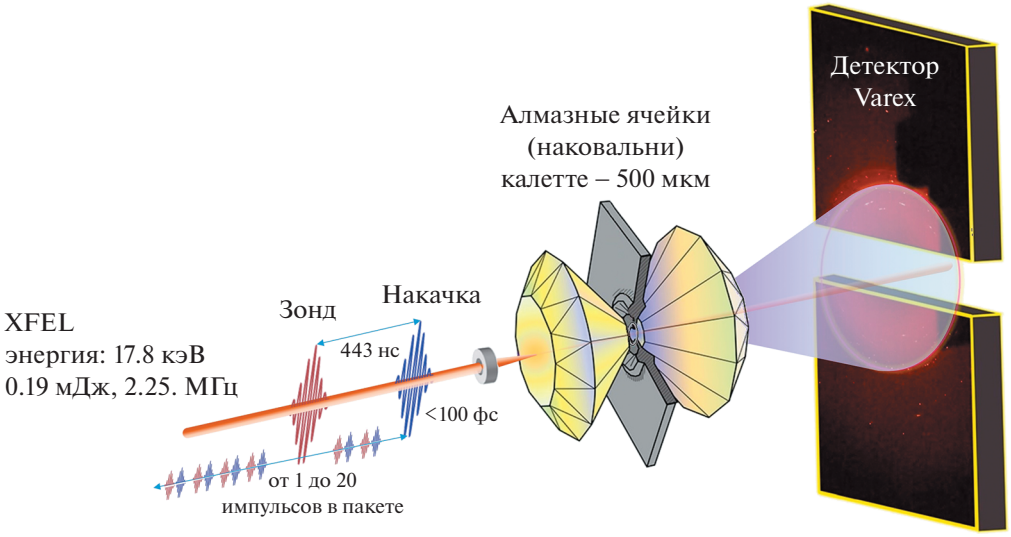


Рис. 38. Схема эксперимента с использованием ячеек с алмазными наковальнями.

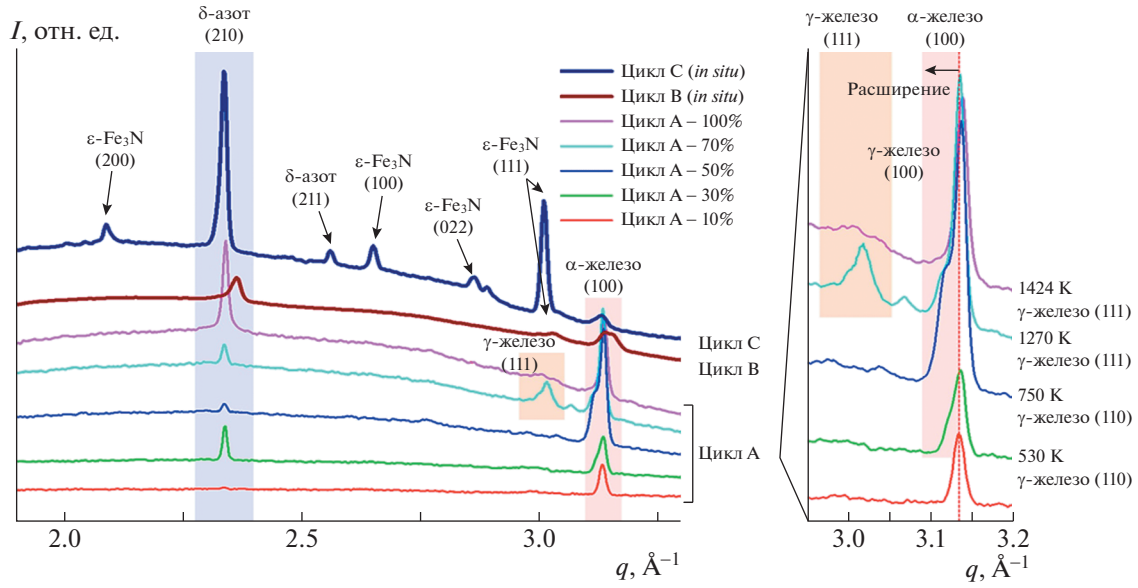


Рис. 39. Дифрактограммы железа и азота во время и после химической реакции *in situ* в режиме накачка–зондирование на XFEL: a – дифрактограммы от Fe-фольги в атмосфере N_2 при 5 ГПа в алмазных ячейках. Проценты указывают долю полного потока XFEL (настроечный цикл). При полном потоке XFEL цикл B содержит 20 последовательных импульсов, цикл C – два последовательных импульса (220 повторений).

Наряду с космохимическими аспектами, связанными с вопросами формирования атмосферного азота на Земле (от его присутствия в протопланетном диске до его современного появления в глубоких мантийных резервуарах), нитриды железа имеют важные технологические применения из-за их большей намагниченности по сравнению с оксидами железа и более низкой стоимости производства по сравнению со сплавами железа.

5.5. Станция "Спектроскопия и когерентное рассеяние" (Spectroscopy and Coherent Scattering, SCS)

Станция предназначена для изучения динамики слабоупорядоченных и неупорядоченных объектов на основе анализа атомной и электронной структуры с использованием методов спектроскопии и когерентного рассеяния в области

мягкого диапазона рентгеновского излучения [129, 130].

Области научного применения – науки о материалах, структурная и клеточная биология, динамика твердого тела вещества [131, 132]. Научные задачи включают в себя исследования химических реакций в жидкостях в реальном времени, изучение сверхбыстрых процессов намагничивания в наномасштабе, а также развитие методов нелинейной рентгеновской спектроскопии. Мягкий диапазон рентгеновского излучения представляется оптимальным для исследования наноструктуры крупных биологических объектов (больших макромолекулярных комплексов, клеток и органелл).

Инструмент SCS предоставляет широкую исследовательскую платформу, основанную на применении следующих методов:

– когерентная рентгеновская дифракционная визуализация (CXDI);

– малоугловое рассеяние рентгеновских лучей (SAX);

– рентгеновская фотонная корреляционная спектроскопия (XPCS);

– резонансное упругое рассеяние рентгеновских лучей (REXS);

– резонансное неупругое рассеяние рентгеновских лучей (RIXS);

– нелинейная рентгеновская спектроскопия (NLXS);

– фотоэлектронная спектроскопия с временным и угловым разрешением (TR-ARPES).

Сочетание когерентного рентгеновского рассеяния и рентгеновской спектроскопии при сверхкороткой длительности импульса РЛСЭ позволяет исследовать динамику атомной структуры одновременно с химической динамикой (электронные состояния) отдельных атомов структуры с фемтосекундным временным и субнанометровым пространственным разрешениями.

Методы резонансного рассеяния, реализованные на станции, позволяют изучать сверхбыстрые магнитные процессы в сложных наноструктурированных системах. Методы рентгеновской фотонной корреляционной спектроскопии (XPCS) широко используются для исследований равновесной и неравновесной динамики жидкостей и магнитных систем. Резонансная неупругая спектроскопия рассеяния и электронная эмиссия будут применены для исследований электронных структур с высоким разрешением на принципиально новом уровне временной детализации [133–135].

Основные параметры станции приведены в табл. 8, схема экспериментальной станции показана на рис. 40. Станция SCS расположена на канале ондулятора SASE3, который производит интенсивные рентгеновские импульсы в области мягкого рентгеновского диапазона (250–3000 эВ) и может работать в режиме розового и монохроматического пучка. Фокусирующая оптика на основе изогнутых рентгеновских зеркал обеспечивает перестраиваемую фокусировку рентгеновского импульса от 1 до 500 мкм. Больший размер пучка оптимизирует спектроскопические исследования с временным разрешением, наилучшим образом используя поток фотонов высокой яркости, исключая при этом радиационное повреждение образца.

Таблица 8. Параметры станции “Спектроскопия и когерентное рассеяние”

Энергия фотонов	0.25–3.00 кэВ
Полоса пропускания $\Delta\lambda/\lambda$	0.5%
Поляризация	Линейная (в горизонтальной плоскости) и круговая
Длительность импульса	1–100 фс
Мощность импульса	до 10 мДж
Фотонов в импульсе	3×10^{11} (после монохроматора)
Размер фокуса	1–500 мкм (настраиваемый)
Исследовательская камера FFT	– Фиксированный держатель образца 50×50 мм^2 – Система непрерывной подачи образцов – Постоянный электромагнит ≤ 0.5T, ТГц-зеркало
Исследовательская камера XRD	– Высоковакуумный дифрактометр ($P < 10^{-9}$ мбар, шесть степеней свободы, плечо детектора 2θ 60°–150°) – Криостат, ТГц-зеркало, система доставки образцов
Химическая станция	– Жидкоструйная система доставки образцов
Детекторы	– 1 Mpx DSSC (4.5 МГц, 800 кадров для каждой серии импульсов) – 2Mpix FastCCD (10 Гц)
Оптические лазеры	– 800 нм, до 1 мДж, 15–100 фс, – 1030 нм, >20 мДж, 850 фс – Преобразования из видимого в ИК – 0.3 ТГц, $LiNbO_3$

Оборудование станции SCS включает в себя экспериментальные камеры для геометрии прямого рассеяния и пропускания (FFT) и геометрии отражения и обратного рассеяния (XRD), а также химическую камеру, оснащенную жидкоструй-

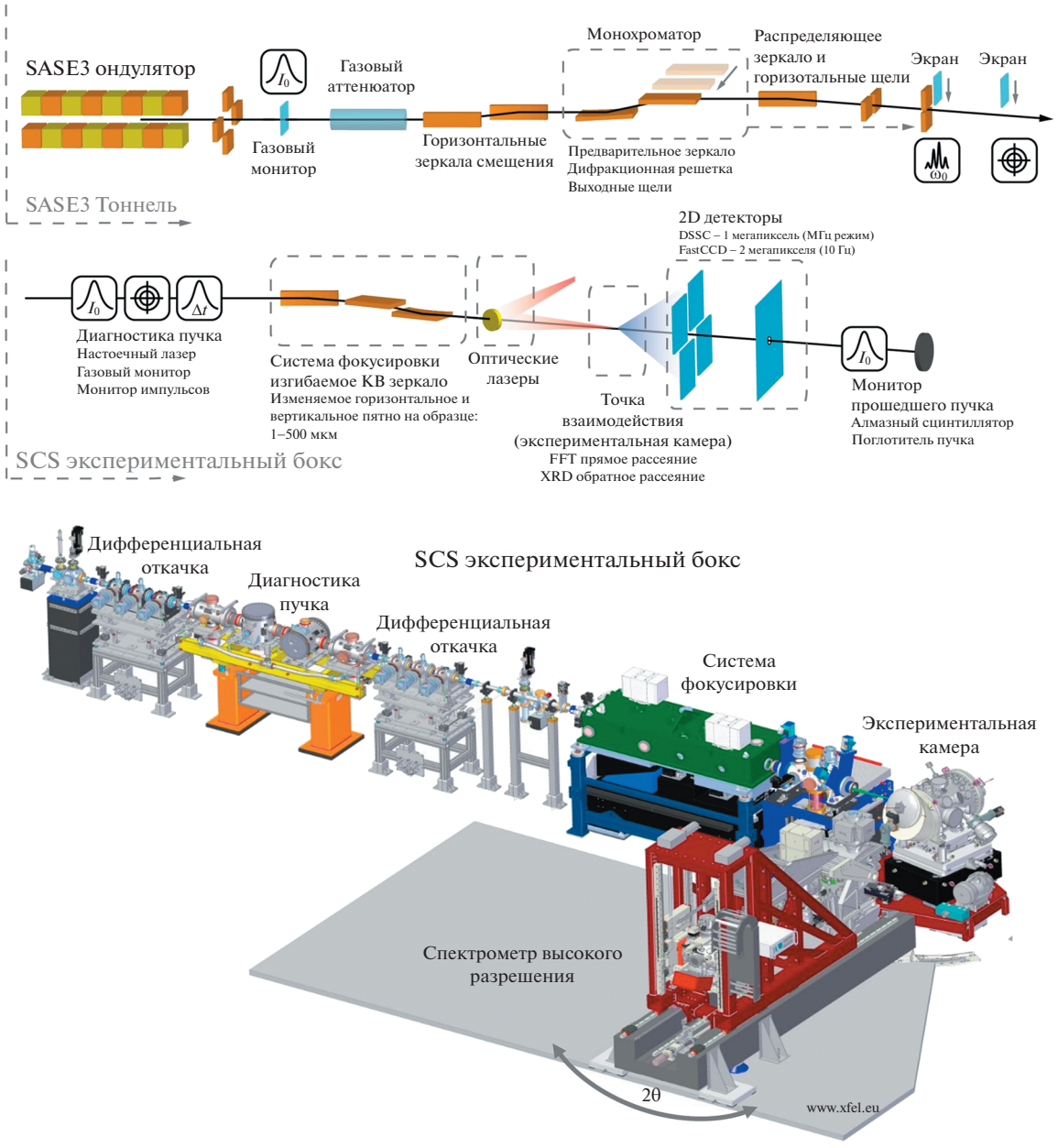


Рис. 40. Экспериментальная станция “Спектроскопия и когерентное рассеяние”.

ной системой доставки образцов. Геометрия рентгеновских экспериментов показана на рис. 41.

Станция оснащена сверхбыстрым детектором 1MPix DSSC (частота повторения 4.5 МГц), двухмерными матричными детекторами и детектором 2Mpix FastCCD (10 Гц) для экспериментов по когерентной дифракции рентгеновских лучей. Инструменты спектроскопии дополнены уникальным спектрометром высокого разрешения резонансного неупругого рассеяния рентгеновских лучей (RIXS), для которого доступны камера обратного рассеяния XRD и химическая камера.

В настоящее время оборудование станции вводится в эксплуатацию, проводятся исследования пространственных и временных характеристик лазерных импульсов, генерируемых ондулятором SASE3, режимов работы ондулятора и исследовательских инструментов станции, в частности определены режимы, обеспечивающие высокую степень пространственной когерентности до 90% и среднюю длительность импульса около 10 фс [136].

Первые работы пользователей, проводимые на стации, посвящены исследованиям пикосекундной структурной и спиновой динамики в нано-

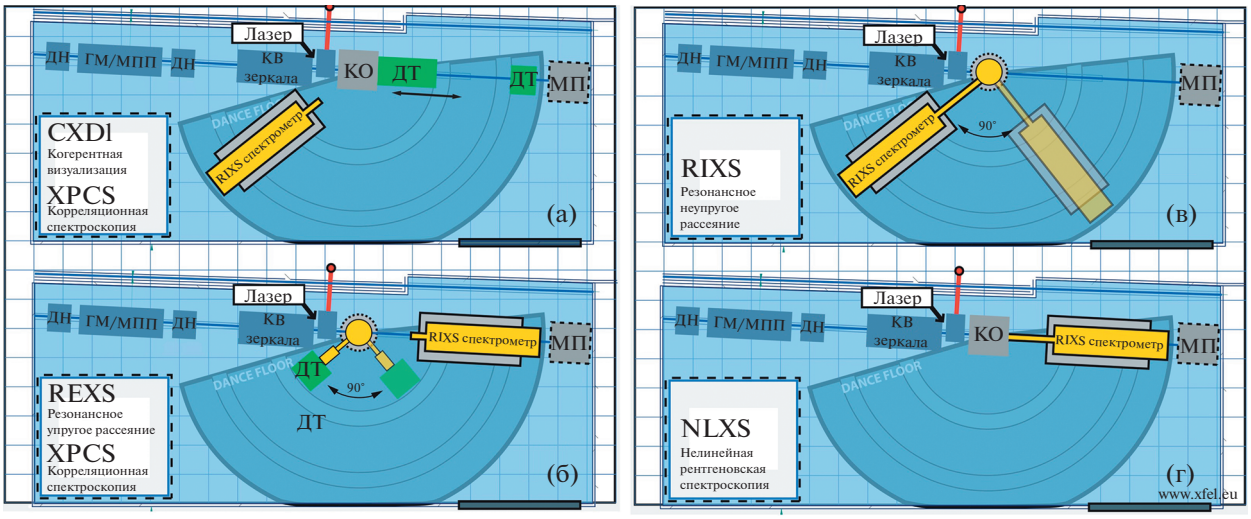


Рис. 41. Геометрия экспериментов станции SCS: а – прямое рассеяние для когерентной дифракционной визуализации CXDI, малоугловое рассеяние SAXS с временным разрешением и фотонной корреляционной спектроскопией XPCS; б – геометрия обратного рассеяния когерентной визуализации CXDI в отражении и для резонансного упругого рассеяния REXS; в – геометрия эксперимента по резонансному неупругому рассеянию RIXS; г – установка эксперимента NLXS (например, стимулированный RIXS). Размер сетки фона – 1 м (ДН – дифференциальная откачка, ГМ – газовый монитор, МПП, МП – монитор положения пучка, КО – камера образца, ДТ – детектор DSSC или FastCCD).

метровом масштабе, связанным с возникновением магнитного порядка в условиях оптического лазерного возбуждения ферромагнитной многослойной структуры Pt/Co [137].

С применением малоуглового рассеяния рентгеновских лучей с временным разрешением в сочетании с моделированием атомной динамики показано, что импульсы оптического лазера фемтосекундной длительности с плотностью энергии 15–50 мДж см$^{-2}$ способны индуцировать высокотемпературное топологическое флуктуационное состояние в ферромагнетных слоях, характерное образованием неупорядоченного массива доменов нанометрового размера локальной намагниченности (скирмионов). Сформированная доменная структура остается стабильной при комнатной температуре. Схема эксперимента показана на рис. 42.

Формирование скирмионов обусловлено ранее ненаблюдаемой переходной фазой флуктуации во временно́м масштабе 300 пс. Этот механизм является не только самым быстрым способом создания топологической фазы, но и в более общем смысле первым открытым механизмом полностью оптического переключения в ферромагнитном материале. Динамика топологического переключения показана рис. 43.

Изучение динамики топологических переключений и флуктуации важно для понимания сопровождающих их сверхбыстрых структурных трансформаций и не ограничивается магнитными текстурами. Данная работа открывает перспективы для дальнейших исследований сверхбыстрых топологических переключений для широкого спектра объектов и систем.

5.6. Станция "Малые квантовые системы" (Small Quantum Systems, SQS)

Станция предназначена для исследования фундаментальных явлений при взаимодействии света с веществом в мягком рентгеновском диапазоне длин волн. Основные приложения связаны с изучением сверхбыстрой динамики классических квантовых систем – свободных атомов, ионов и молекул, атомных и молекулярных кластеров и нанообъектов при воздействии высокоинтенсивных, сверхкоротких импульсов рентгеновского лазера. Уникальные характеристики РЛСЭ и инструментальное оснащение станции открывают принципиально новые исследовательские возможности для целого ряда актуальных направлений физики и химии:

– фотоиндуцированная динамика молекул и атомов;

– нелинейные взаимодействия фотона с веществом;

– динамика фотоионизации в сильных внешних полях;

– сверхбыстрая визуализация в газовой фотохимии;

– дифракционная визуализация малых атомных систем;

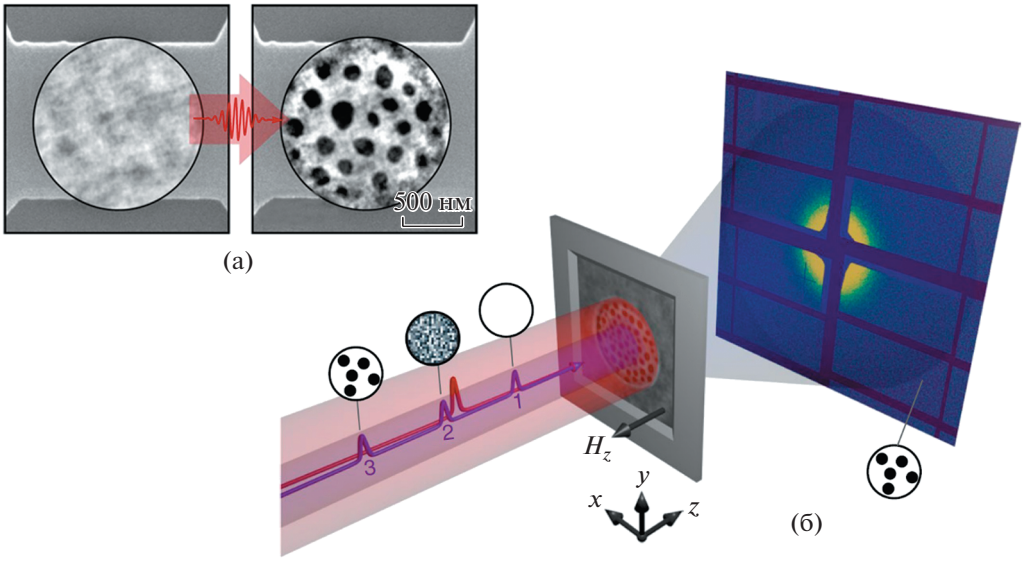


Рис. 42. Топологический фазовый переход из однородного состояния (слева) в состояние скирмиона высокой плотности (справа) (а). Экспериментальная схема. Интервал между рентгеновскими импульсами 1, 2 и 3 – 60 мкс (б).

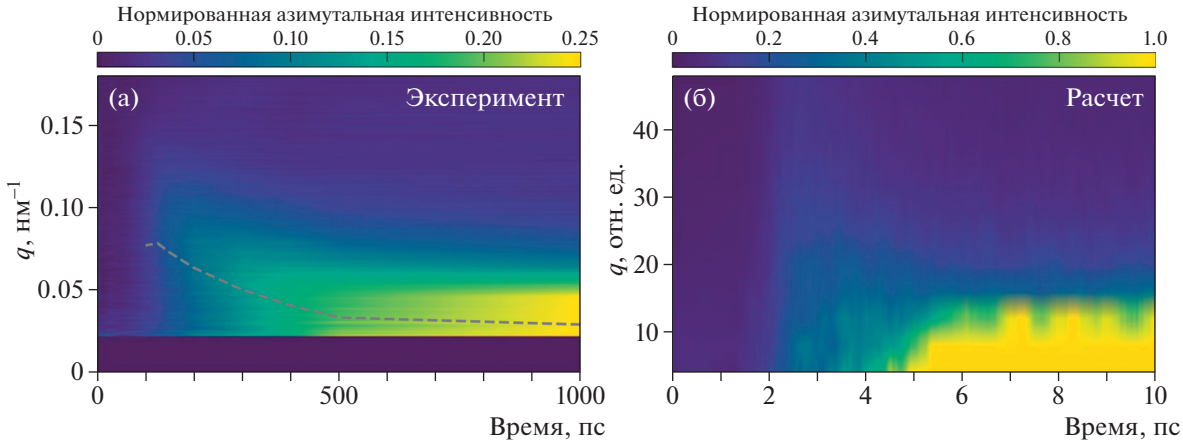


Рис. 43. Временная эволюция малоуглового рассеяния рентгеновских лучей. Пунктирная линия показывает максимум рассеянной интенсивности, который обратно пропорционален среднему расстоянию между зародышами скирмионов. Общая интенсивность постоянна после 300 пс (а). Расчетные данные рассеяния на основе атомного моделирования (б).

– генерация аттосекундных импульсов в мягкой рентгеновской области.

Области научного применения станции – атомная и молекулярная физика, квантовая физика, химическая динамика, нелинейные процессы и оптические явления, а также вещество в экстремальных условиях [138–141]. Станция позволяет использовать в работе широкую линейку методов рентгеновской, фотоэлектронной и ионной спектроскопии в сочетании с методами когерентного рассеяния рентгеновских лучей [142, 143]. Использование мягких рентгеновских фотонов позволяет управлять возбуждением определенных электронных подоболочек при возбуждении атомов или определенных сайтов в молекулярных системах. Конструкция спектрометров станции оптимизирована для работы с высокой частотой импульсов рентгеновского лазера в условиях регистрации различных частиц в режиме совпадений.

Для исследований с временным разрешением доступна мощная перестраиваемая оптическая лазерная система. Ультракороткие импульсы РЛСЭ длительностью <25 фс в сочетании с оптическим лазером позволяют наблюдать сверхбыст-

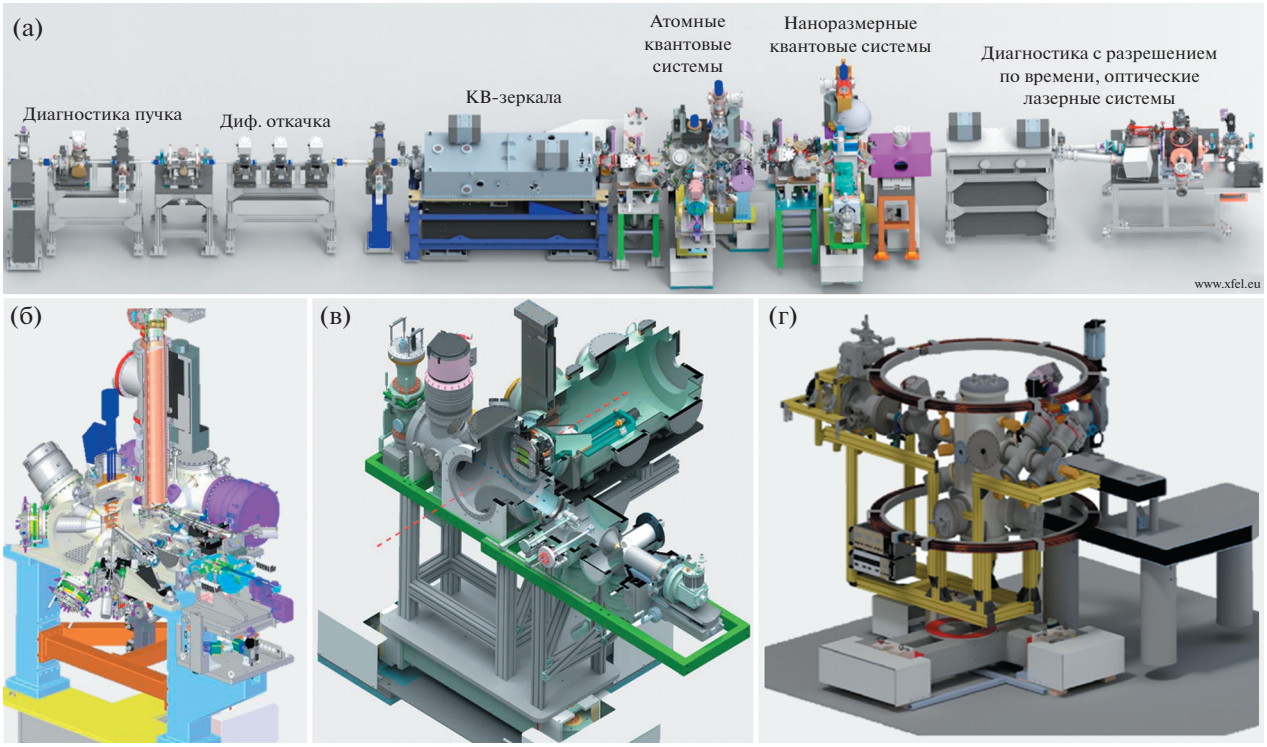


Рис. 44. Экспериментальная станция “Малые квантовые системы” (а). Экспериментальные инструменты станции: “Атомные квантовые системы” (б), “Наноразмерные квантовые системы” (в), “Реакционный микроскоп” (г).

рую ядерную динамику с беспрецедентным временным разрешением.

Образцы доставляются в газообразной или жидкой форме с применением микроструйных, микрофлюидных устройств, сверхзвуковых газовых систем, с помощью оптического пинцета или в гелиевых нанокаплях [144]. Схема станции представлена на рис. 44, основные параметры станции представлены в табл. 9.

Станция расположена на канале ондулятора SASE3, генерирующего рентгеновское излучение в мягком диапазоне энергий фотонов от 270 до 3000 эВ (до 2×10^{14} фотонов в импульсе). Для экспериментов доступны прямой пучок от ондулятора SASE3 с шириной полосы пропускания $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-2}$ или монохроматический пучок – $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-4}$. Монохроматор расположен в тоннеле ондулятора SASE3 и состоит из сменных изогнутых зеркал предварительной фокусировки для двух диапазонов энергий 0.25–1.5 и 1.5–3 кэВ, а также плоской дифракционной решетки с переменным шагом (VLS, variable line spacing) [145]. Окончательно пучок формируется системой из двух рентгеновских зеркал Киркпатрика–Баеза (KB mirror), фокусирующих луч рентгеновского лазера в пятно размером <1 мкм в трех разных точках взаимодействия в исследовательской камере. Плотность мощности рентгеновского импульса в области взаимодействия составляет более 10^{18} Вт/см^2.

Станция SQS включает три основных взаимозаменяемых исследовательских инструмента, представляющих собой сменные модули – вакуумные камеры с установленными детекторами и системами доставки проб (для определенных типов экспериментов и образцов):

– атомные квантовые системы (AQS, atomic quantum systems);

– наноразмерные квантовые системы (NQS, nano-sized quantum systems);

– реакционный микроскоп (REMI, reaction microscope).

Исследовательский инструмент атомных квантовых систем (AQS) предназначен для исследования свободных атомов или малых молекул в газовой фазе. В вакуумной камере установлено несколько типов спектрометров для регистрации заряженных частиц электронов, ионов и флуоресцентных фотонов с возможностью быстрого переключения между детекторами без вентиляции или перемещения камеры. Приборное оснащение инструмента атомных квантовых систем позволяет применять следующие методы:

– электронная спектроскопия с угловым разрешением;

– ионная спектроскопия;

– рентгеновская высоковакуумная флуоресценция (до 10^{-10} мбар);

Таблица 9. Параметры станции “Малые квантовые системы”

Энергия фотонов	0.5–3.0 кэВ
Поляризация	Линейная, горизонтальная
Энергия импульса	до 10 мДж (в зависимости от энергии)
Размер фокуса	1–3 мкм, перестраиваемый
Длительность импульса	10–25 фс
Полоса пропускания	10^{-2} – ширина полосы SASE3, 10^{-4} – монохроматизированный
Количество импульсов в пакете	400 при 2.2 МГц, 200 при 1.1 МГц, 100 при 0.5 МГц, 20 при 0.1 МГц
Специальные режимы	Сверхкороткие импульсы (<10 фс)
Детекторы	DSSC 1 Мпикс, 4.5 МГц pnCCD 1 Мпикс, 150 Гц
Оптические лазеры	800 нм, 15 фс, 1.1 МГц, 0.25 мДж 800 нм, 15 фс, 200 кГц, 1.3 мДж 800 нм, 15 фс, 100 кГц, 1.8 мДж 1030 нм, 900 фс, 1.1 МГц, 3 мДж 1030 нм, 400 пс, 1.1 МГц, 3 мДж

– параллельное детектирование в режиме совпадения (*e*-, ион, γ) [146].

Электронная и ионная спектроскопия реализована на базе времяпролетного электронного спектрометра (electron time of flight, eToF), спектрометра карт скоростей (velocity map imaging, VMI) и электронного спектрометра с магнитным полем (magnet bottle electron spectrometer, MBES). Основные параметры спектрометров приведены в табл. 10.

Три детектора спектрометра eToF установлены в дипольной плоскости (перпендикулярно оси распространения луча) и три дополнительных детектора установлены в задней полусфере рассеяния для измерения недипольных эффектов. В сочетании с быстрым анализатором они позволяют измерять электронные спектры высокого разрешения с максимальной частотой импульсов рентгеновского лазера 4.5 МГц. Вертикальный (нижний) спектрометр eToF работает также в режиме детектирования ионов.

Спектрометр карт скоростей VMI позволяет измерять спектры кинетической энергии с угловым разрешением как для ионов, так и для электронов. Скорость считывания ограничена значением 10 Гц. Магнитный электронный спектрометр MBES установлен на выходе из камеры AQS и позволяет проводить высокоэффективную времяпролетную спектроскопию электронов. Комбинация с ионным времяпролетным спектрометром (iTOF, ion time of flight) Wiley/McLaren дает возможность проводить измерения совпадений электронов и ионов во всем диапазоне энергий, доступном на станции SQS.

Экспериментальный инструмент “Наноразмерные квантовые системы” (NQS) предназначен для исследования взаимодействия наночастиц, биомолекул, инертных газов, включая нанокапли сверхтекучего гелия и кластеры металлов. Исследовательский инструмент позволяет использовать следующие методы:

– электронная и ионная спектроскопия;

– когерентная дифракционная визуализация;

– накачка–зондирование с применением импульсов оптических лазеров (ТГц, ИК) и рентгеновского лазера в качестве накачки.

Таблица 10. Основные параметры спектрометров инструмента AQS

	Электронные времяпролетные спектрометры	Спектрометр карт скоростей	Магнитный электронный и ионный времяпролетный спектрометры
Образцы	Газовая фаза		
Детектируемые частицы	Электроны и ионы		
Детекторы	MCP, 450 пс	MCP + фосфорный экран	MCP + фосфорный экран
Частота	4.5 МГц	10 Гц со CMOS камерой	4.5 МГц (электроны)
Кинетическая энергия	10 эВ–5 кэВ	до 1.2 кэВ	0–3 кэВ
Энергетическое разрешение	70 мэВ при 800 эВ кин. энергии (измеренный)	2% (измеренное), 1% (расчетное)	до 0.2% (расчетное)
Углы в дипольной плоскости, град	0, 90, 54.7		
Разрешение по массе			до 1% (iToF)
Угол обзора	0.14% от 4π (возможны различные апертуры)	100% от 4π	до 100% от 4π

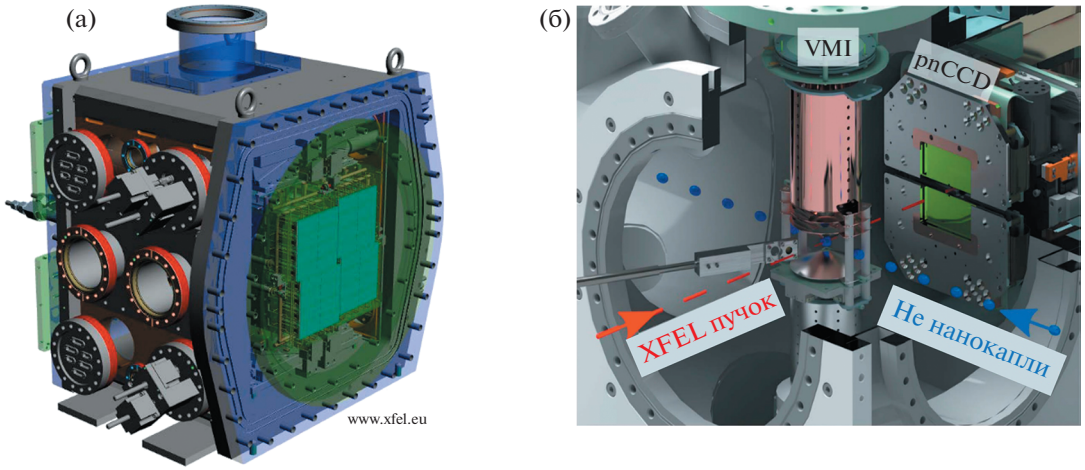


Рис. 45. Детектор фотонов DSSC (а). Экспериментальная камера исследовательского инструмента “Наноразмерные квантовые системы” в режиме измерения с нанокаплями гелия с установленным детектором pnCCD (б).

Вакуумная камера с дифференциальной откачкой включает в себя сменные оптические лазеры, фотонные, ионные и электронные детекторы, которые могут работать одновременно.

Двухкоординатные рентгеновское детекторы позволяют регистрировать одиночные фотоны при высокой частоте кадров в условиях высокого вакуума (рис. 45).

Детектор фотонов DSSC (DEPMOS Sensor with Signal Compression) [147] на основе датчика DEPFET “полевой транзистор с обедненным *p*-каналом” [148] состоит из четырех перемещаемых кремниевых дрейфовых сенсоров (mini-SDD, silicon drift detector) с гексагональной формой пикселя, имеет размеры 210 × 210 мм^2 при разрешении 1 Мп и позволяет записывать рентгеновские изображения с максимальной частотой кадров 4.5 МГц.

Детектор фотонов с зарядовой связью (pnCCD, *pn*-type charge coupled device) [149] с разрешением 1 Мп и размером 75 × 75 мм^2 состоит из двух подвижных модулей, имеет низкий уровень шума и высокую квантовую эффективность, что позволяет детектировать одиночные фотоны во всем диапазоне энергий станции при высоком динамическом диапазоне с частотой считывания 10 Гц. Основные параметры детекторов приведены в табл. 11.

Одновременно с рассеянными рентгеновскими фотонами инструмент NQS позволяет регистрировать ионные и электронные спектры с помощью спектрометров iToF и VMI.

*Реакционный микроскоп (**REMI**)* используется при проведении экспериментов по изучению динамики молекул и атомов в газовой фазе и измерения ионного и электронного импульса при ионизации молекулы на станции [150, 151]. Микроскоп REMI позволяет восстановить структуру молекулы и ее ионных фрагментов в условиях ионизации и диссоциации при воздействии излучения рентгеновского лазера (рис. 46). Принцип работы прибора основан на измерении в режиме совпадения импульсов фотоэлектронов (рассеянных молекулой в момент фотопоглощения) и ионов, образовавшихся в результате ионизации молекулы. При этом фотоэлектроны, испущенные молекулой, могут быть использованы для “подсвечивания” молекулы изнутри [152–154]. Дифракционная картина их рассеяния на электронной плотности молекулы позволяет восстановить структуру молекулы.

Станция начала работу в декабре 2018 г., к октябрю 2019 г. все три инструмента станции SQS были установлены и введены в эксплуатацию.

В первой “пользовательской” публикации [155] представлены результаты наблюдения сверхбыстрого распада одиночных молекул кислорода при воздействии мощного импульса рентгеновского лазера. Картины электронной дифракции, визуализирующие первые 20 фс молекулярного распада, получены с применением реакционного микроскопа REMI [156]. На рис. 47 представлена схема фотоэлектронной дифракции при кулоновском взрыве. Эволюция дифракционной картины энергетических фотоэлектронов, испускаемых молекулой кислорода, показана на рис. 48. Дифракционная картина сильно изменяется в зависимости от расстояния между двумя атомами в молекуле кислорода, таким образом визуализируя распад молекулы в фемтосекундном масштабе. Картины соответствуют началу распада, т.е. межъядерным расстояниям в диапазоне ~1.2–1.8 Å.

Результаты исследования динамики кулоновских взрывов [157] ароматической молекулы йодо-

Таблица 11. Параметры детекторов инструмента NQS

	Детектор фотонов DSSC	Детектор фотонов pnCCD
Энергетический диапазон	0.5–6 кэВ	0.3–25 кэВ
Эффективность	100%	>80% (0.7–12 кэВ)
Размер матрицы	210 × 210 мм^2	78 × 78 мм^2
Количество пикселей	1024 × 1024	1024 × 1024
Размер пикселя	~204 × 236 мкм^2 (гексагональный)	75 × 75 мкм^2
Динамический диапазон	256 (1 кэВ)	до 10000 (1 кэВ)
Разрешение	единичный фотон (>1 кэВ)	единичный фотон
Частота кадров	4.5 МГц	150 Гц
Центральная	2 мм	2 мм
Вакуумная совместимость	<10^{-7} мбар	<10^{-8} мбар

пиридина, полученные на станции SQS, представлены в сборнике работ за 2019 г. [56]. При воздействии мощных импульсов излучения рентгеновского лазера наблюдалась полная фрагментация молекулы в результате сильной ионизации атомов и кулоновского разлета созданных ионов. На основе измерения направлений и скоростей всех молекулярных фрагментов были сделаны выводы о молекулярной геометрии и динамике распада.

На рис. 49 показаны геометрическая структура и импульсная карта ионов углерода из молекулы йодопиридина, позволяющая однозначно определить каждый атом молекулы. Аналогичные карты построены для атомов водорода. Данный подход представляет особенный интерес для исследований реакций изомеризации, миграции водорода и многих других химических реакций.

Нанокапли сверхтекучего гелия (при температуре 0.5 K) представляют собой уникальную среду для изолирования одиночных атомов, молекул, ионов и кластеров [158]. При этом изучение равновесных и неравновесных состояний, процессов взаимодействия частиц и сопровождающих их явлений становится доступным на квантовом уровне. Внутри капли гелия исследуемые частицы могут свободно перемещаться и быстро достигают своего основного состояния, что позволяет получить высококачественные и хорошо разрешенные спектры, а также дифракционные картины частиц со сложным химическим строением. При добавлении нескольких частиц они способ-

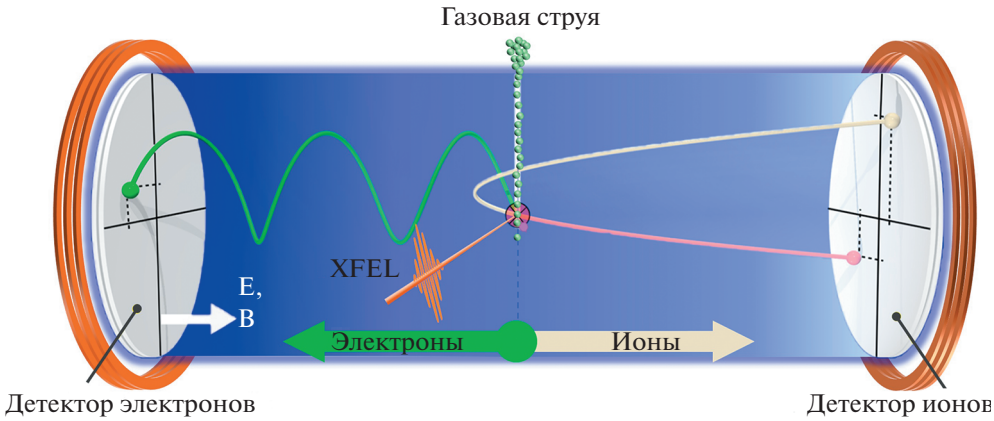


Рис. 46. Схема реакционного микроскопа. Молекулы доставляются в область взаимодействия в сверхзвуковой газовой струе. Импульс рентгеновского излучения от XFEL попадает в одну из молекул, создавая множество ионов и электронов. Они направляются к двум чувствительным ко времени и положению детекторам на противоположных сторонах спектрометра с помощью статических электрических и магнитных полей.

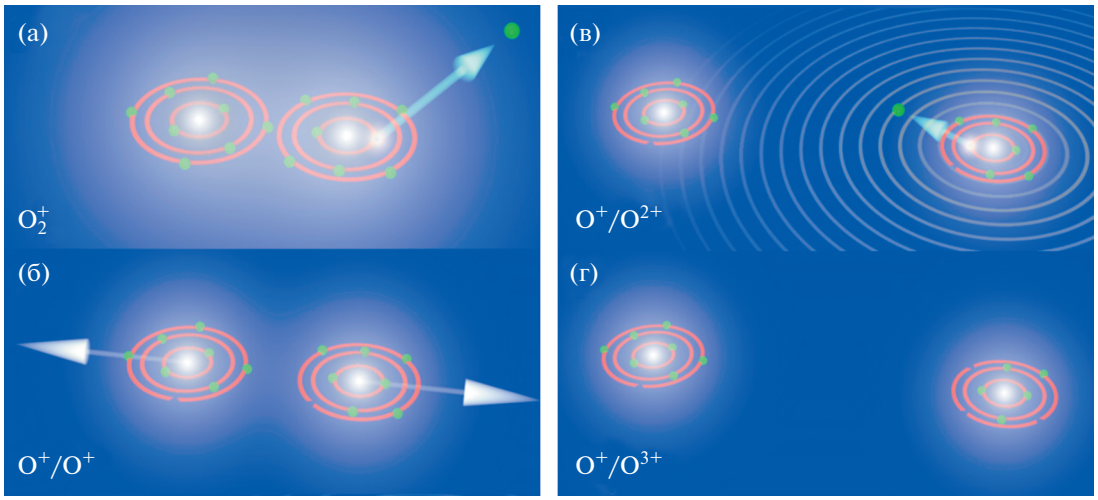


Рис. 47. Схема фотоэлектронной дифракции при кулоновском взрыве молекулы O_2: а – электрон *k*-оболочки ионизируется при облучении светом XFEL; б – после первого оже-распада молекула становится двухзарядной и фрагментируется; в – во время фрагментации второй фотон вызывает испускание другого электрона *k*-оболочки, освещающего молекулу изнутри; г – наблюдаемое конечное состояние O^+/O^{3+} (шаги а–в происходят во время одного импульса XFEL ~ 25 фс) [155].

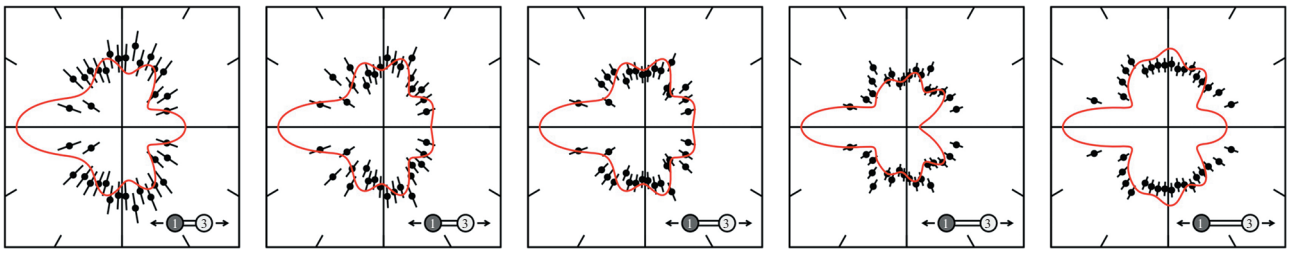


Рис. 48. Усредненная по поляризации фотоэлектронная дифракционная картина от молекулы кислорода. Показан второй фотоэлектрон, испускаемый в каскадном процессе, используемый для исследования молекулярного потенциала. Молекула выровнена горизонтально, а электрон испускается с правого атома кислорода. Точки – записанные данные со статистическими погрешностями, огибающая – результат аппроксимации с использованием суммы полиномов Лежандра.

ны агрегироваться и образовывать наноструктуры, в том числе, в условиях, далеких от равновесных [159], когда формирование структуры контролируется кинетикой, а не термодинамикой [160].

В работе, представленной в сборнике [56], на станции SQS с применением когерентной дифракционной визуализации выполнены первые эксперименты по исследованию наносистем (атомов и молекул) в каплях гелия. С использованием инструмента NQS были измерены серии дифракционных картин для различных атомов и молекулярных кластеров: атомов ксенона и серебра, молекул ацетонитрила и йодометана. Впервые метод когерентной дифракционной визуализации был применен в [161] для изучения формы чистых капель (без примесей) и структуры внутренних квантовых вихрей.

Сверхтекучие капли были получены при расширении находящегося под давлением гелия в вакуум через криогенно охлаждаемое сопло. Средний размер капель контролировался на основе измерения давления и температуры сопла и составлял порядка сотен нанометров. Исследуемые частицы захватывались каплями внутри специальной камеры, расположенной вдоль траектории полета капель. Чистые капли или капли с частицами достигали точки взаимодействия с импульсами рентгеновского лазера. Энергия фотонов в экспериментах составляла ~1 кэВ.

Примеры полученных дифракционных изображений для чистых капель гелия и капель с внедренными примесями показаны на рис. 50. Дифракционные картины на чистых каплях имеют концентрическую кольцевую структуру, что ука-

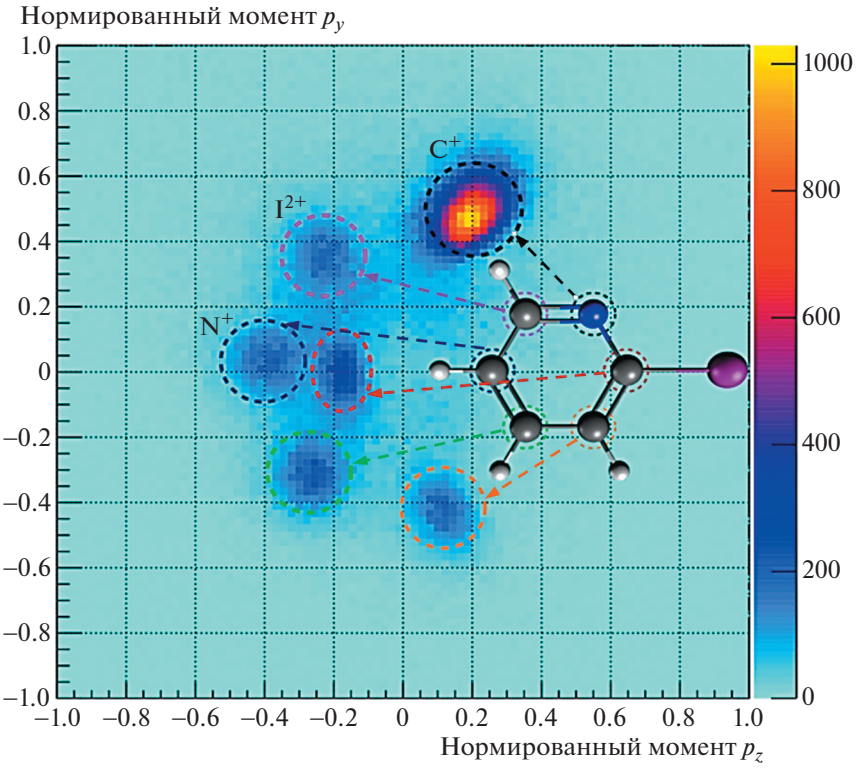


Рис. 49. Карта ионного импульса молекул йодопиридина (C_5H_4IN). Структура молекулы показана пунктирными линиями. Все импульсы ионов нормированы таким образом, что величина импульса I^{2+} равна единице. В данной системе координат импульс I^{2+} направлен вдоль оси z ($p_x = p_y = 0, p_z = 1$), и импульс N^+ находится в верхней половине карты ($p_x = 0, p_y > 0$). Импульсы ионов N^+ и C^+ наносятся на график в этой системе координат.

зывает на преимущественно сферическую форму капель. К искажению формы капли приводит наличие квантовых вихрей, при этом чем больше возможное количество вихрей, тем более сложную форму приобретает капля [162]. Дифракционные картины от атомов и молекулярных кластеров демонстрируют наличие от одного до двух атомных ядер в капле и сложную сеть молекулярных кластеров внедренных примесей.

Представленные результаты открывают новые возможности для дальнейшего изучения различных далеких от равновесия наноструктур в сверхтекучих каплях гелия. Предварительный анализ также показывает, что формирование структуры может контролироваться свойствами капель и внедренных примесей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя итоги, можно сказать, что реализован один из самых амбициозных и технически сложных научных проектов – создан самый яркий на земле источник рентгеновского излучения, открывающий новые горизонты для исследований и получения прорывных результатов во многих областях наук: физика, химия, материаловедение, науки о жизни, биология и биомедицина, создание новых лекарственных и медицинских препаратов.

Совокупность таких характеристик рентгеновского лазера, как сверхвысокая яркость, практически полная пространственная когерентность и сверхмалая длительности импульса, позволят проводить рентгеновскую структурную диагностику на принципиально новом уровне, когда ученые смогут буквально увидеть фундаментальные процессы, происходящие в мире атомов и молекул. Высокая пространственная когерентность импульса РЛСЭ представляет основу качественного перехода от классических дифракционных методов исследования атомной структуры, требующих упорядоченных кристаллических образцов достаточно больших размеров, к непосредственной 3D-визуализации атомной структуры практически любых объектов на основе анализа картины когерентного рассеяния.

Новые когерентные методы позволят изучать структуру одиночных молекул белков и вирусов с атомарным разрешением, что крайне важно для исследования мембранных белков – важнейших белков-мишеней для создания лекарственных препаратов, кристаллизация которых представляет большую проблему. Также становится воз-

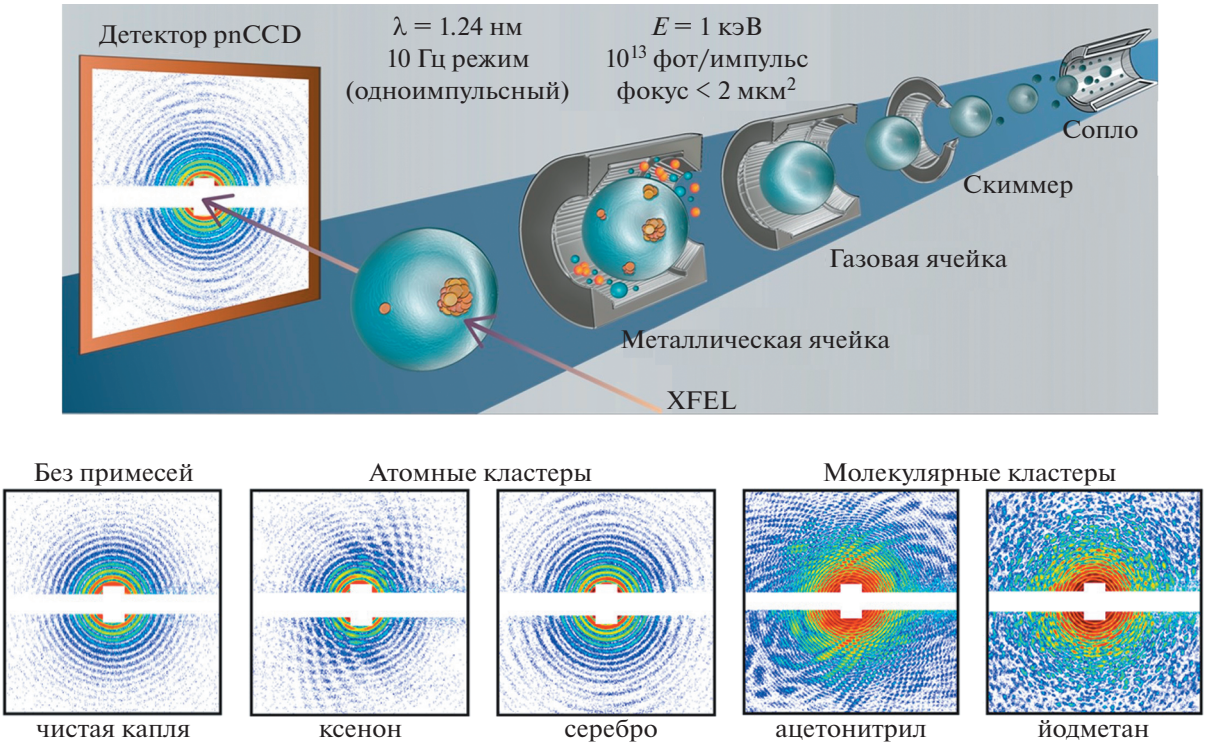


Рис. 50. Схема эксперимента с нанокаплями гелия, выполненного на станции SQS. Примеры дифракционных изображений чистых капель и капель, содержащих атомные и молекулярные кластеры.

можной расшифровка структуры материалов и объектов, получаемых только в виде наноразмерных кристаллитов, определение структуры которых невозможно на источниках третьего поколения ввиду малых размеров или плохого качества образца, например нанокристаллов, для задач микроэлектроники и фармакологии.

Сверхвысокая яркость пучка при его острой субмикронной фокусировке позволит воздействовать на твердое тело потоком электромагнитных волн с гигантской по плотности мощностью (до 10^{18} В/см). С помощью XFEL можно создавать и изучать суперэкстремальные, невероятные условия для существования материи, такие, например, как сверхвысокие температуры одновременно с мегабарными давлениями, гигантским электрическим или магнитным полем, исследовать разнообразные явления и структурные превращения, характерные для веществ в экстремальном состоянии: фазовые переходы, сопровождающие их нестационарные процессы, нелинейные квантовые эффекты, образование холодной или разогретой плазмы, полых ионов, двулучепреломление вакуума и т.д. Все это – новые возможности для изучения материи с высокой плотностью энергии, которая существует в ядрах экзопланет и внутри звезд.

Европейский лазер на свободных электронах открывает совершенно новую область временных масштабов для структурной диагностики, недоступную другим методам, когда мы сможем изучать динамику твердых тел с атомарным пространственным разрешением одновременно с пикосекундным и фемтосекундным разрешением. Становится доступным наблюдение за химическими реакциями, спиновыми взаимодействиями и магнитными явлениями, структурной динамикой твердых тел и жидкостей, а также конформационными изменениями биологических систем в реальном времени. Это позволит изучить многие ключевые быстропротекающие и многостадийные процессы в живой и неживой природе: фотоэлектрические и каталитические реакции, магнитные переключения, биологические и биохимические реакции, включая фотосинтез. Понимание фундаментальных факторов, контролирующих эти процессы, позволит усовершенствовать производительность промышленных систем, создавать новые материалы с уникальными свойствами, новые лекарства и методы терапии.

Если говорить глобально, проект XFEL позволит сделать новый принципиальный шаг на пути не только детального, глубинного понимания фундаментальных природных механизмов, но и создания природоподобных технологий.

Участие России в проекте является крайне важным с точки зрения интеллектуального вклада, а также технического и финансового обеспечения

проекта. Российские ученые – вторые после германских коллег по числу научных сотрудников в штате XFEL. Наши исследования на Европейском лазере на свободных электронах в значительной степени проводятся в рамках национальной программы, реализуемой под научным руководством НИЦ “Курчатовский институт”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pellegrini C.* // Eur. Phys. J. 2012. V. 37. № 5. P. 659. https://doi.org/10.1140/epjh/e2012-20064-5
2. *Einstein A.* // Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft 1916. V. 18. P. 318.
3. *Фабрикант В.А.* // Труды Всесоюзного электротехнического института. 1940. Т. 41. С. 236.
4. *Басов Н.Г., Прохоров А.М.* // ЖЭТФ. 1954. Т. 27. № 4. С. 431.
5. *Gordon J.P., Zeiger H.J., Townes C.H.* // Phys. Rev. 1954. V. 95. P. 282. https://doi.org/10.1103/PhysRev.95.282
6. *Maiman T.H.* // Nature. 1960. V. 187. P. 493. https://doi.org/10.1038/187493a0
7. *Tissandier F., Gautier J., Goddetet J.-P. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 124. P. 133902. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.133902
8. *Померанчук И.* // ЖЭТФ. 1939. Т. 9. С. 915.
9. *Iwanenko D., Pomeranchuk I.* // Phys. Rev. 1944. V. 65. P. 343. https://doi.org/10.1103/PhysRev.65.343
10. *Арцимович Л.А., Померанчук И.Я.* // ЖЭТФ. 1946. Т. 16. С. 379.
11. *Гинзбург В.Л.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1947. Т. 11. С. 165.
12. *Motz H.* // J. Appl. Phys. 1951. V. 22. P. 527. https://doi.org/10.1063/1.1700002
13. *Motz H., Thon W., Whitehurst R.* // J. Appl. Phys. 1953. V. 24. P. 826. https://doi.org/10.1063/1.1721389
14. *Phillips R.* // A Fast Wave Interaction with First Order Axial Bunching. Conf. on Electron Tube Res. Mexico City. 1959. June 24–26.
15. *Phillips R.* // IRE Trans. 1960. V. 7. № 4. P. 231. https://doi.org/10.1109/T-ED.1960.14687
16. *Madey J.* // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. № 5. P. 1906. https://doi.org/10.1063/1.1660466
17. *Elias L.R., Fairbank W.M., Madey John M.J. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1976. V. 36. P. 717. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.36.717
18. *Kondratenko A.M., Saldin E.L.* // Part. Accel. 1980. V. 10. P. 207.
19. *Derbenev Y.S., Kondratenko A.M., Saldin E.L.* // Nucl. Instrum. Methods. A. 1982. V. 193. P. 415. https://doi.org/10.1016/0029-554X(82)90233-6
20. *Varfolomeev A.A., Ivanchenkov S.N., Khlebnikov A.S. et al.* // Nucl. Instrum. Methods. A. 1995. V. 359. P. 85. https://doi.org/10.1016/0168-9002(94)01638-0
21. *Murphy J., Pellegrini C.* // J. Opt. Soc. Am. B. 1985. V. 2. P. 259. https://doi.org/10.1364/JOSAB.2.000259
22. *Hogan M., Pellegrini C., Rosenzweig J. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 4867. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.81.4867
23. *Ayvazyan V., Baboi N., Bohnet I. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. 104802. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.104802
24. *Pellegrini C.* // Phys. Scr. 2016. 014004. https://doi.org/10.1088/1402-4896/aa5281
25. *Allaria E., Appio R., Badano L. et al.* // Nat. Photon. 2012. V. 6. P. 699. https://doi.org/10.1038/nphoton.2012.233
26. *Emma P., Akre R., Arthur J. et al.* // Nat. Photon. 2010. V. 4. P. 641. https://doi.org/10.1038/nphoton.2010.176
27. *Ishikawa T., Aoyagi H., Asaka T. et al.* // Nat. Photonics. 2012. V. 6. P. 540. https://doi.org/10.1038/nphoton.2012.141
28. *Patterson B., Abela R., Braun H. et al.* // New J. Physics. 2010. V. 12. P. 035012. https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/3/035012
29. *Schreiber S., Faatz B., Feldhaus J. et al.* // 2012 FEL Conf. (Nara, Japan). 2012. V. 37.
30. *Galler A., Gawelda W., Mykola B. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2019. V. 26. P. 1432. https://doi.org/10.1107/S1600577519006647
31. *Cho H., Dashdorj N., Schotte F. et al.* // Proc. Nat. Acad. Sci. 2010. V. 107. P. 7281. https://www.jstor.org/stable/25665345
32. *Khalil M., Marcus M.A., Smeigh A. et al.* // J. Phys. Chem. A. 2006. V. 110. P. 38. https://doi.org/10.1021/jp055002q
33. *Lockard J., Rachford A.A., Smolentsev G. et al.* // J. Phys. Chem. A. 2010. V. 114. P. 12780. https://doi.org/10.1021/jp1088299
34. *Abeghyan S., Bagha-Shanjani M., Chen G. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2019. V. 26. P. 302. https://doi.org/10.1107/S1600577518017125
35. *Koch A., Hart M., Nicholls T. et al.* // J. Instrum. 2013. V. 8. P. 11001. https://doi.org/10.1088/1748-0221/8/11/C11001
36. *Von Hamos L.* // Naturwissenschaften. 1932. V. 20. P. 705. https://doi.org/10.1007/BF01494468
37. *Bergmann U., Cramer S.* // Proc. SPIE. 1998. V. 3448. P. 198. https://doi.org/10.1117/12.332507
38. *Благов А.Е., Ковальчук М.В., Кон В.Г. и др.* // ЖЭТФ. 2005. Т. 128. № 5. С. 893.
39. *Благов А.Е., Ковальчук М.В., Кон В.Г. и др.* // Кристаллография. 2006. Т. 51. № 5. С. 779.
40. *Благов А.Е., Ковальчук М.В., Писаревский Ю.В. и др.* // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 3. С. 411.
41. *Ковальчук М.В., Таргонский А.В., Благов А.Е. и др.* // Кристаллография. 2011. Т. 56. № 5. С. 886.
42. *Благов А.Е., Писаревский Ю.В., Ломонов В.А. и др.* // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 1. С. 51. https://doi.org/10.7868/S0023476113010050
43. *Благов А.Е., Просеков П.А., Элиович Я.А. и др.* // Кристаллография. 2015. Т. 60. № 2. С.189. https://doi.org/10.7868/S0023476115020058

44. *Благов А.Е., Ковальчук М.В., Писаревский Ю.В. и др.* // Приборы и техника эксперимента. 2016. Т. 5. С. 109. https://doi.org/10.7868/S0032816216050050
45. *Благов А.Е., Ковальчук М.В.* // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 2. С. 191. https://doi.org/10.7868/S0023476116010033
46. *Blagov A.E., Kulikov A.G., Kovalchuk M.V. et al.* // Experimental Techniques. 2017. V. 41. № 5. P. 517. https://doi.org/10.1007/s40799-017-0194-1
47. *Благов А.Е., Писаревский Ю.В., Ковальчук М.В. и др.* // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 6. С. 870. https://doi.org/10.7868/S0023476117060030
48. *Марченков Н.В., Куликов А.Г., Аткнин И.И. и др.* // Успехи физ. наук. 2019. Т. 189. № 2. С. 187. https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.06.038348
49. *Благов А.Е., Марченков Н.В., Писаревский Ю.В. и др.* // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 1. С. 51. https://doi.org/10.7868/S0023476113010050
50. *Marchenkov N.V., Kulikov A.G., Blagov A.E. et al* // Rev. Sci. Ins. 2018 V. 89. № 9. P. 095105 https://doi.org/10.1063/1.5036955
51. *Bedzyk M., Materlik G., Kovalchuk M.V.* // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1984. V. 30. № 5. P. 2453. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.30.2453
52. *Bedzyk M., Materlik G., Kovalchuk M.V.* // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1984. V. 30. № 8. P. 4881. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.30.4881
53. *Ковальчук М.В., Кон В.Г.* // Успехи физ. наук. 1986. Т. 149. № 5. С. 69. https://doi.org/10.3367/UFNr.0149.198605c.0069
54. *Zheludeva S., Kovalchuk M., Novikova N. et al.* // Thin Solid Films. 1990. V. 193–194. P. 395. https://doi.org/10.1016/S0040-6090(05)80049-5
55. *Kazimirov A., Kovalchuk M., Kharitonov I. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 1992. V. 63. № 1. P. 1019. https://doi.org/10.1063/1.1143182
56. https://www.xfel.eu/sites/sites_custom/site_xfel/content/e35178/e56171/e56388/xfel_-file108253/200707_RZ_XFEL_Annual-Report_2019_Digital_eng.pdf
57. *Naumova M., Kalinko A., Meng J. et al.* // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. P. 214301. https://doi.org/10.1063/1.5138641
58. *Naumova M.A., Kalinko A., Abdellah M. et al.* // J. Phys. Chem. Lett. 2020. V. 11. P. 2133. https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.9b03883
59. *Khakhulin D., Otte F., Biednov M. et al.* // Appl. Sci. 2020. V. 10. P. 995. https://doi.org/10.3390/app10030995
60. *Kinschel D., Bacellar C., Cannelli O. et al.* // Nat. Commun. 2020. V. 11. P. 4145. https://doi.org/10.1038/s41467-020-17923-w
61. *Bacellar C., Kinschel D., Mancini G. et al.* // PNAS. 2020. V. 117. № 36. P. 202009490. https://doi.org/10.1073/pnas.2009490117
62. *Steinert M., Schneider B., Dechert S. et al.* // Angew. Chem. Int. Ed. 2014. V. 53. P. 6135. https://doi.org/10.1002/anie.201403068
63. *Giewekemeyer K., Aquila A., Loh N.-T.D. et al.* // IUCrJ. 2019. V. 6. № 3. P. 1. https://doi.org/10.1107/S2052252519002781
64. *Mancuso A.P., Aquila A., Batchelor L. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2019. V. 26. № 3. P. 1. https://doi.org/10.1107/S1600577519003308
65. *Allahgholi A., Becker J., Bianco L. et al.* // J. Instrum. 2016. V. 11. P. 02066. https://doi.org/10.1088/1748-0221/11/02/C02066
66. *Allahgholi A., Becker J., Delfs A. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2019. V. 26. P. 74. https://doi.org/10.1107/S1600577518016077
67. *Palmer G., Kellert M., Wang J. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2019. V. 26. № 2. P. 328. https://doi.org/10.1107/S160057751900095X
68. *Chapman H., Fromme P., Barty A. et al.* // Nature. 2011. V. 470. P. 73. https://doi.org/10.1038/nature09750
69. *Nançoz C., Licari G., Beckwith J.S. et al.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2018. V. 20. № 10. P. 7254. https://doi.org/10.1039/C7CP08390D
70. *Letrun R., Lang B., Yushchenko O. et al.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2018. V. 20. № 48. P. 30219. https://doi.org/10.1039/C8CP05356A
71. *Gorkhover T., Ulmer A., Ferguson K. et al.* // Nat. Photonics. 2018. V. 12. № 3. P. 150. https://doi.org/10.1038/s41566-018-0110-y
72. *Neutze R., Wouts R., Weckert E. et al.* // Nature. 2000. V. 406. P. 752. https://doi.org/10.1038/35021099
73. *Chapman H., Caleman C., Timneanu N.* // Philos. Trans. R. Soc. B. Biol. Sci. 2014. V. 369. P. 20130313. https://doi.org/10.1098/rstb.2013.0313
74. *Russell D.* // Luke Inverse Problems. 2005. V. 21. P. 37. https://doi.org/10.1088/0266-5611/21/1/004
75. *Shechtman Y., Eldar Y.C., Cohen O. et al.* // IEEE Signal Processing Magazine. 2015. V. 32. № 3. P. 87. https://doi.org/10.1109/MSP.2014.2352673
76. *Loh N., Elser V.* // Phys. Rev. E. 2009. V. 80. № 2. P. 026705. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.80.026705
77. *Nakano M., Miyashita O., Jonic S. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2017. V. 24. № 4. P. 727. https://doi.org/10.1107/S1600577517007767
78. *Gaffney K.J., Chapmanet H.N.* // Science. 2007. V. 316. P. 1444. https://doi.org/10.1126/science.1135923
79. *Kurta R.P., Donatelli J.J., Yoon C.H. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 119. P. 158102. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.158102
80. *Schulz J., Bielecki J., Doak R. B. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2019. V. 26. № 2. P. 339. https://doi.org/10.1107/S1600577519000894
81. *Bielecki J., Hantke M.F., Daurer B.J. et al.* // Sci. Adv. 2019. V. 5. P. 5. https://doi.org/10.1126/sciadv.aav8801
82. *Wiedorn M.O., Oberthür D., Bean R. et al.* // Nat. Commun. 2018. V. 9. P. 4025. https://doi.org/10.1038/s41467-018-06156-7

83. *Grünbein M., Bielecki J., Gorel1 A. et al.* // Nat. Commun. 2018. V. 9. P. 3487. https://doi.org/10.1038/s41467-018-05953-4
84. *Yefanov O., Oberthür D., Bean R. et al.* // Struct. Dyn. 2019. V. 6. P. 064702. https://doi.org/10.1063/1.5124387
85. *Barty A., Kirian R.A., Maia F.R.N.C. et al.* // J. Appl. Cryst. 2014. V. 47. P. 1118. https://doi.org/10.1107/S1600576714007626
86. *White T.A., Kirian R.A., Martin A.V. et al.* // J. Appl. Cryst. 2012. V. 45. P. 335. https://doi.org/10.1107/S0021889812002312
87. *Gisriel C., Coe J., Letrun R. et al.* // Nat Commun. 2019. V. 10. P. 5021. https://doi.org/10.1038/s41467-019-12955-3
88. *Pandey S., Bean R., Sato T. et al.* // Nature Methods. 2020. V. 17. P. 73. https://doi.org/10.1038/s41592-019-0628-z
89. *Chapman H., Barty A., Bogan M. J. et al.* // Nature Physics. 2006. V. 2. P. 839. https://doi.org/10.1038/nphys461
90. *Bielecki J., Maia F.R.N.C., Mancuso A.P.* // Structural Dynamics. 2020. V. 7. P. 040901. https://doi.org/10.1063/4.0000024
91. *Ayyer K., Geloni G., Kocharyan V. et al.* // Optica. 2021. V. 8. P. 15. https://doi.org/10.1364/OPTICA.410851
92. *Lundholm I., Sellberg J.A., Ekeberg T. et al.* // IUCrJ. 2018. V. 5. P. 531. https://doi.org/10.1107/s2052252518010047
93. *Gorkhover T., Ulmer A., Ferguson K. et al.* // Nature Photon. 2018. V. 12. P. 150. https://doi.org/10.1038/s41566-018-0110-y
94. *Rose M., Bobkov S., Ayyer K. et al.* // IUCrJ. 2018. V. 5. P. 727. https://doi.org/10.1107/S205225251801120X
95. *Samygina V.R., Pichkur E.B., Vorovich M.F. et al.* // Int. J. Biomed. 2019. V. 9. № S1. P. 29. https://doi.org/10.21103/IJBM.9.Suppl_1.P29
96. *Madsen A., Hallmann J., Ansaldi G. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2021. V. 28. P. 637. https://doi.org/10.1107/S1600577521001302
97. *Sun Z., Fan Ji., Li H. et al.* // ACS Nano. 2018. V. 12. № 8. P. 7509. https://doi.org/10.1021/acsnano.8b01838
98. *Kim C.* // Microsc. Microanal. 2018. V. 24. № 2. P. 50.
99. *Kim D., Chung M., Carnis J. et al.* // Nat. Commun. 2018. V. 9. № 1. P. 3422. https://doi.org/10.1038/s41467-018-05464-2
100. *Singer A., Zhang M., Hy S. et al.* // Nat. Energy. V. 3. № 8. P. 641. https://doi.org/10.1038/s41560-018-0184-2
101. *Lu W., Friedrich B., Noll T. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 2018. V. 89. P. 063121. https://doi.org/10.1063/1.5027071
102. *Просеков П.А., Носик В.Л., Благов А.Е.* // Кристаллография. 2021. Т. 66. № 6. С. 843. https://doi.org/10.31857/S002347612106028X
103. *Madsen A., Hallmann J., Ansaldi G. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2021. V. 28. № 2. P. 637. https://doi.org/10.1107/S1600577521001302
104. *Kovalchuk M.V., Blagov A.E., Dyakova Y.A. et al.* // Cryst. Growth Des. 2016. V. 16. № 4. P. 1792. https://doi.org/10.1021/acs.cgd.5b01662
105. *Марченкова М.А., Ковальчук М.В., Благов А.Е. и др.* // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 1. С. 10. https://doi.org/10.7868/S0023476116010148
106. *Ковальчук М.В., Просеков П.А., Марченкова М.А. и др.* // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 5. С. 749. https://doi.org/10.7868/S0023476114050105
107. *Ковальчук М.В., Алексеева О.А., Благов А.Е. и др.* // Кристаллография. 2019. Т. 64 № 1. С. 10. https://doi.org/10.1134/S0023476119010156
108. *Бойкова А.С., Дьякова Ю.А., Ильина К.Б. и др.* // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 6. С. 876. https://doi.org/10.7868/S0023476117060078
109. *Boikova A.S., Dyakova Y.A., Kovalchuk M.V. et al.* // Acta Cryst. 2017. V. 73. P. 591. https://doi.org/10.1107/S2059798317007422
110. *Vassholz M., Hoeppe H., Hagemann J. et al.* // Nat. Commun. 2021. V. 12. P. 3468. https://doi.org/10.1038/s41467-021-23664-1
111. *Osterhoff M.* // J. Synchrotron Rad. 2021. V. 28. P. 987. https://doi.org/10.1107/S1600577521003052
112. *Hagemann J.* // Göttingen Series in X-Ray Physics. 2017. V. 24. https://doi.org/10.17875/gup2017-1055
113. *Hagemann J., Vassholz M., Hoeppe H. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2021. V. 28. P. 52. https://doi.org/10.1107/S160057752001557X
114. *Van den Berg Q., Fernandez-Tello E.V., Burian T. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 120. № 5. P. 055002. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.055002
115. *Bae L.J., Zastrau U., Chung H.-K. et al.* // Opt. Express. 2018. V. 26. № 5. P. 6294. https://doi.org/10.1364/OE.26.006294
116. *Nakatsutsumi M., Sentoku Y., Korzhimanov A. et al.* // Nat. Commun. 2018. V. 9. P. 280. https://doi.org/10.1038/s41467-017-02436-w
117. *Lindl J.* // Phys. Plasmas. 1995. V. 2. № 11. P. 3933. https://doi.org/10.1063/1.871025
118. *Malka V., Faure J., Gauduel Y. A. et al.* // Nat. Phys. 2008. V. 4. № 6. P. 447. https://doi.org/10.1038/nphys966
119. *Sims M., Jaret S.J., Carl E.-R. et al.* // Earth Planet. Sci. Lett. 2019. V. 507. P. 166. https://doi.org/10.1016/j.epsl.2018.11.038
120. *Preston T.R., Appel1 K., Brambrink1 E. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2019. V. 114. № 1. P. 014101. https://doi.org/10.1063/1.5070140
121. *Kraus D., Hartley N.J., Frydrych S. et al.* // Phys. Plasmas. 2018. V. 25. № 25. P. 056313. https://doi.org/10.1063/1.5017908
122. *Kraus D., Vorberger J., Pak A. et al.* // Nat. Astron. 2017. V. 1. № 9. P. 606. https://doi.org/10.1038/s41550-017-0219-9
123. *Wöstmann M., Mitzner R., Noll T. et al.* // J. Phys B. 2013. V. 46. P. 164005. https://doi.org/10.1088/0953-4075/46/16/164005
124. *Roling S., Samoylova L., Siemer B. et al.* // Proc. SPIE. 2012. V. 8504. P. 850407. https://doi.org/10.1117/12.965547

125. *Nakatsutsumi M.* // Plasma Phys. Control. Fusion. 2017. V. 59. P. 014028. https://doi.org/10.1088/0741-3335/59/1/014028
126. *Liermann H.P., Konôpková Z., Appel K. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2021. V. 28. P. 688. https://doi.org/10.1107/S1600577521002551
127. *Zastrau U., Appel K., Baehtz C. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2021. V. 28. P. 1393. https://doi.org/10.1107/S1600577521007335
128. *Hwang H., Kim T., Cynn H. et al.* // J. Phys. Chem. Lett. 2021. V. 12. P. 3246. https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.1c00150
129. *Gorobtsov O.Y., Mercurio G., Capotondi F. et al.* // Nat. Commun. 2018. V. 9. № 1. P. 4498. https://doi.org/10.1038/s41467-018-06743-8
130. *Tschentscher T., Bressler C., Grünert J. et al.* // Appl. Sci. 2017. V. 7. № 6. P. 592. https://doi.org/10.3390/app7060592
131. *Mercurio G., Makhotkin I.A., Milov I. et al.* // New J. Phys. 2019. V. 21. P. 033031. https://doi.org/10.1088/1367-2630/aafa47
132. *Bergeard N., Mougin A., Izquierdo M. et al.* // Phys. Rev. 2017. V. 96. P. 064418. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.064418
133. *Iacocca E., Liu T.-M., Reid A.H. et al.* // Nat. Commun. 2019. V. 10. № 1. P. 1756. https://doi.org/10.1038/s41467-019-09577-0
134. *Halilov S., Gorelov E., Izquierdo M. et al.* // Phys. Rev. 2017. V. 96. P. 205144. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.205144
135. *Granitzka P.W., Jal E., Guyader L.L. et al.* // Nano Lett. 2017. V. 17. № 4. P. 2426. https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b00052
136. *Khubbutdinov R., Gerasimova N., Mercurio G. et al.* // Struct. Dyn. 2021. V. 8. P. 044305. https://doi.org/10.1063/4.0000127
137. *Büttner F., Pfau B., Böttcher M. et al.* // Nat. Mater. 2021. V. 20. P. 30. https://doi.org/10.1038/s41563-020-00807-1
138. *Holzmeier F., Bello R.Y., Hervé M. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 121. № 10. P. 103002. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.103002
139. *Kierspel T., Bomme C., Fraia M.D. et al.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2018. V. 20. № 30. P. 20205. https://doi.org/10.1039/C8CP00936H
140. *Fisher-Levine M., Boll R., Ziaee F. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2018. V. 25. № 2. P. 336. https://doi.org/10.1107/S1600577517018306
141. *Ilchen M., Douguet N., Mazza T. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 118. P. 013002. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.013002
142. *Müller L., Hartmann G., Schweitzer S. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 2018. V. 89. № 3. P. 036103. https://doi.org/10.1063/1.5018396
143. *Leitner T., Josefsson I., Mazza T. et al.* // J. Chem. Phys. 2018. V. 149. № 4. P. 044307. https://doi.org/10.1063/1.5035149
144. *Bielecki J., Hantke M.F., Daurer B.J. et al.* // Sci. Adv. 2019. V. 5. № 5. https://doi.org/10.1126/sciadv.aav8801
145. *Reininger R., de Castro A.* // Nucl. Instrum. Methods. 2005. V. 538. P. 760. https://doi.org/10.1016/j.nima.2004.09.007
146. *Becker U.* // J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2000. V. 112. № I. P. 1. https://doi.org/10.1016/S0368-2048(00)00202-4
147. *Porro M., Andricek L., Bombelli L. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2010. V. 624. P. 509. https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.02.254
148. *Kemmer J., Lutz G.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 1987. V. 253. № 3. P. 365. https://doi.org/10.1016/0168-9002(87)90518-3
149. *Kuster M., Ahmed K., Ballak K.-E. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2021. V. 28. P. 576. https://doi.org/10.1107/S1600577520015659
150. *Ullrich J., Moshammer R., Dorn A. et al.* // Rep. Prog. Phys. 2003. V. 66. P. 1463. https://doi.org/10.1088/0034-4885/66/9/203
151. *Fischer D.* // GSI Sci. Rep. 2008. V. 290.
152. *Landers A., Th. Weber I., Ali A. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. P. 013002. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.013002
153. *Sanchez A., Amini K., Wang S.-J. et al.* // Nat. Commun. 2021. V. 12. P. 1520. https://doi.org/10.1038/s41467-021-21855-4
154. *Pullen M., Wolter B., Le A.-T. et al.* // Nat. Commun. 2015. V. 6. P. 7262. https://doi.org/10.1038/ncomms8262
155. *Kastirke G., Markus S., Weller M. et al.* // Phys. Rev. X. 2020. V. 10. P. 021052. https://doi.org/10.1103/PhysRevX.10.021052
156. *Dorner R., Mergela V., Jagutzkia O. et al.* // Phys. Rep. 2000. V. 330. P. 95. https://doi.org/10.1016/S0370-1573(99)00109-X
157. *Pitzer M., Kunitski M., Johnson A.S. et al.* // Science. 2013. V. 341. № 6150. P. 1096. https://doi.org/10.1126/science.1240362
158. *Goyal S., Schutt D.L., Scoles G.* // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 69. P. 933. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.69.933
159. *Toennies J.P., Vilesov A.F.* // Angew. Chem. Int. Ed. 2004. V. 43. P. 2622. https://doi.org/10.1002/anie.200300611
160. *Meakin P.* // Fractals, Scaling and growth far from equilibrium Cambridge University Press, Cambridge. 1997. V. 5. https://doi.org/10.1002/(SICI)1099-1204(199911/12)12:6%3C493::AID-JNM346%3E3.0.CO;2-7
161. *Gessner O., Vilesov A.* // Annu. Rev. Phys. Chem. 2019. V. 70. P. 173. https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-042018-052744
162. *Ancilotto F., Pi M., Barranco M. et al.* // Phys. Rev. 2018. V. 97. P. 184515. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.184515

EDN: WHGYKS
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 726–734

УДК 621.384.6, 538.9, 54.07

ИСТОЧНИК СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЧЕТВЕРТОГО ПОКОЛЕНИЯ С РЕНТГЕНОВСКИМ ЛАЗЕРОМ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ “СИЛА”: КОНЦЕПЦИЯ УСКОРИТЕЛЬНО-НАКОПИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА

© 2022 г. М. В. Ковальчук[1,2], А. Е. Благов[1,2,*], О. С. Нарайкин[1], Н. В. Марченков[1,2], Р. А. Сенин[1], А. В. Таргонский[1,2]

[1] Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия
[2] Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия
**E-mail: Blagov_AE@nrcki.ru*

Поступила в редакцию 30.03.2022 г.
После доработки 30.03.2022 г.
Принята к публикации 01.04.2022 г.

Представлены результаты разработки концептуального проекта ускорительно-накопительного комплекса источника синхротронного излучения четвертого поколения с лазером на свободных электронах “СИЛА” (источник “СИЛА”), создаваемого в Федеральном государственном бюджетном учреждении “Институт физики высоких энергий имени А.А. Логунова Национального исследовательского центра “Курчатовский институт” г. Протвино. Представлено общее описание создаваемой установки, включая ее основные параметры, характеристики генерируемого излучения и технические решения, применяемые для их достижения. Особое внимание уделено ускорительно-накопительному комплексу: линейному ускорителю, работающему на полной энергии 6 ГэВ, и магнитооптической системе кольцевого накопителя. Обсуждаются приоритетные научные направления и задачи, на решение которых направлен проект создания источника “СИЛА”.

DOI: 10.31857/S0023476122050071

ВВЕДЕНИЕ

Прогресс в области науки и технологий стран – мировых лидеров определяется уровнем и наличием установок класса “мегасайенс”, среди которых особая роль в развитии прикладных наук отведена источникам синхротронного излучения (**СИ**) и рентгеновским лазерам на свободных электронах (**ЛСЭ**). Специализация и решаемые на мегаустановках задачи определяют основные параметры и требования к техническим характеристикам каждого конкретного источника СИ или ЛСЭ. Например, энергия электронов кольцевых ускорителей может составлять от 0.4 до 8 ГэВ, длина орбиты – от нескольких десятков метров до нескольких километров [1], эмиттанс – от единиц нм рад до десятков пм рад (рис. 1).

В мире насчитывается несколько десятков источников СИ, которые можно разделить на четыре поколения. Первое поколение – ускорители заряженных частиц, созданные для изучения физики высоких энергий, оснащенные дополнительно выводными каналами для экспериментов с СИ (паразитическим для данного класса ускорителей) [2]. Второе поколение – специализированные ускорительные комплексы, созданные для генерации СИ из поворотных магнитов [3, 4]. Третье поколение – синхротроны со специальными генераторами СИ – ондуляторами и виглерами, установленными в прямолинейных секциях кольцевого ускорителя [5–7]. Для третьего поколения характерны высокая спектральная яркость и непрерывная инжекция электронов. Наконец, четвертое поколение – ускорители с существенно оптимизированной магнитной структурой [8, 9], позволяющей приблизиться к дифракционному пределу размера источника фотонов. Каждое поколение отличается от предыдущего повышением яркости СИ более чем на порядок [10].

Характеристики рентгеновского излучения передовых современных источников СИ – яркость, когерентность и временно́е разрешение [12] – уже сегодня позволяют проводить эксперименты по исследованию структуры широчайшего спектра объектов на качественно новом уровне по сравнению с источниками предыдущих поколений. Так, для визуализации атомной структуры, традиционно требующей образцов достаточно больших размеров, возможности источников четвертого поколения – в первую очередь яркость

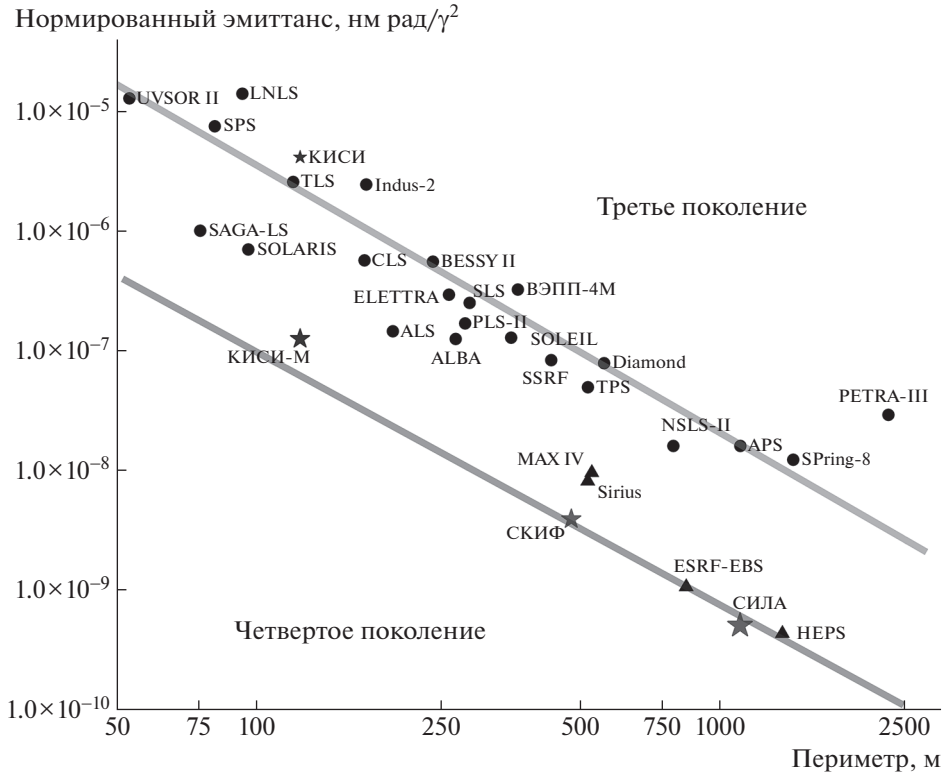


Рис. 1. Сравнение величин, нормированных натуральных горизонтальных эмиттансов ряда СИ [11] – чем ниже на диаграмме расположен источник, тем выше его яркость и степень поперечной когерентности.

и когерентность – позволяют перейти к 3D-визуализации атомной структуры неупорядоченных объектов практически любых размеров (микронных, субмикронных и нанометровых). Рентгеновские ЛСЭ открывают совершенно новую область временных масштабов и позволяют изучать динамику различных систем со сверхвысоким (фемтосекундным) разрешением по времени [13]. Понимание на атомном уровне таких процессов, как формирование структуры материалов [14–16], химические и биохимические реакции, белковая динамика в клетках и вирусах, открывает принципиально новые горизонты практически во всех областях науки: от химии и материаловедения до биологии, фармакологии и медицины. Полученные новые знания позволят разрабатывать перспективные методы диагностики и лечения болезней, создавать новейшие типы лекарств, развивать промышленные технологии, связанные, например, с катализом, химическим синтезом, переработкой полезных ископаемых, а также синтезировать материалы с уникальными свойствами для наноэлектроники, нейроморфных и природоподобных систем, аккумуляторов и новой энергетики (например, для хранения водорода), сверхтвердые и самовосстанавливающиеся покрытия.

В 2019 г. в Российской Федерации утверждена Федеральная научно-техническая программа развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы (**Программа**), в рамках которой предусмотрено создание национальной сети научных центров синхротронных исследований: источника синхротронного излучения четвертого поколения с лазером на свободных электронах – “СИЛА” в Московской области, источника четвертого поколения “СКИФ” в Новосибирской области, источника синхротронного излучения “КИСИ-Курчатов” в Москве (модернизация единственного действующего в Российской Федерации специализированного источника СИ до третьего поколения), источника синхротронного излучения “РИФ” в Дальневосточном регионе на о. Русский.

Создание сетевой мегасайенс-инфраструктуры синхротронных исследований станет логичным развитием и продолжением советских школ реализации крупных научных проектов, берущих свое начало из атомного проекта [17]. Так, многие базовые принципы – основы работы источников СИ – заложены советскими учеными в середине XX века: открытие СИ [18], принцип автофазировки [19], ондуляторное излучение [20], принцип самоусиления спонтанной эмиссии [21] и др.

Флагманский проект Программы – источник СИ четвертого поколения с лазером на свободных электронах “СИЛА” (источник “СИЛА”) – представляет собой многопользовательскую междисциплинарную установку класса “мегасайенс” для исследований по целому ряду направлений физики, химии, кристаллографии, материаловедения, биологии и медицины. В экспериментальном зале источника “СИЛА” будет размещено несколько десятков исследовательских станций и лабораторий.

Разработка источника СИ четвертого поколения проводится в НИЦ “Курчатовский институт” с 2011 г. совместно с ведущими научными центрами мира ESRF (Франция), DESY (Германия) и SPring-8 (Япония). Согласно разработанной концепции источник “СИЛА” будет обладать характеристиками, соответствующими крупнейшим синхротронам мира: периметр основного накопителя более 1100 м, энергия электронов – 6 ГэВ, широкий диапазон энергий СИ – от десятков электронвольт до сотен килоэлектронвольт, высокая яркость и пространственная когерентность. Уникальность и основная сложность проекта заключаются в объединении высокоэнергичного кольцевого источника СИ четвертого поколения и рентгеновского ЛСЭ в единый ускорительно-накопительный комплекс с общей исследовательской инфраструктурой [22, 23].

В настоящей работе представлено описание ускорительно-накопительного (синхротронного) комплекса источника “СИЛА”, включающего в себя линейный ускоритель и кольцевой накопитель.

УСКОРИТЕЛЬНО-НАКОПИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ИСТОЧНИКА “СИЛА”

Синхротронный комплекс источника “СИЛА” разработан для обеспечения генерации пучков СИ высокой яркости и когерентности в широком диапазоне энергий рентгеновской области электромагнитного спектра. Для ондуляторного излучения будут доступны энергии фотонов от 5 до 200 кэВ при яркости 10^{21}–10^{22} ф $с^{-1}$ $мм^{-2}$ $мрад^{-1}$, для излучения из дипольного магнита-излучателя – от 0.1 до 150 кэВ при яркости до 3×10^{17} ф $с^{-1}$ $мм^{-2}$ $мрад^{-1}$ и до 500 кэВ в режиме вигглерного излучения при яркости 10^{18}–10^{19} ф $с^{-1}$ $мм^{-2}$ $мрад^{-1}$. Проектная пиковая яркость излучения ЛСЭ – 10^{33} ф $с^{-1}$ $мм^{-2}$ $мрад^{-1}$ при длительности импульса до 200 фс или менее (в режиме “self-seeding”) [24].

Основные параметры синхротронного комплекса источника “СИЛА” приведены в табл. 1.

Таблица 1. Основные характеристики синхротронного комплекса источника “СИЛА”

Наименование параметра установки	Значение
Энергия, ГэВ	6
Ток пучка, мА	200
Горизонтальный эмиттанс, пм рад	70
Периметр/длина источника, м	1103
Число периодов ускорителя	40
Потери энергии на оборот, МэВ	2.0
Дисперсия энергии электронов	0.85×10^{-3}
Напряжение ВЧ, МВ	5.0
Длина сгустка, мм	~3
Частота ВЧ, МГц	352.2
Кратность ВЧ	1296 ($3^4 \times 2^4$)
Длина прямолинейного промежутка, м	5.3
Энергия электронов линейного ускорителя, ГэВ	6
Длина волны излучения рентгеновского ЛСЭ	<0.1 нм

Концепцией создания источника “СИЛА” предусмотрено использование линейного ускорителя электронов (**ЛУЭ**) на энергию 6 ГэВ, одновременно в качестве инжектора на полную энергию (top-up linac) для накопительного кольца синхротрона и драйвера для ЛСЭ.

Достоинствами данной конфигурации являются высокая (95% и более) эффективность инжекции в накопительное кольцо и возможность инжекции пучка с заметно меньшим эмиттансом по сравнению с бустерным кольцевым накопителем. Использование одного общего ускорителя для накопительного кольца и рентгеновского лазера обеспечивает существенное сокращение стоимости и сроков выполнения проекта, позволит интегрировать два современных источника фотонов с различными временными и яркостными характеристиками. Как известно, ЛСЭ обеспечивают рекордные параметры по пиковой яркости при сверхкороткой длительности рентгеновского импульса, в то время как для СИ характерна высокая средняя по времени яркость. Близкими аналогами применяемого подхода являются источник MAX-IV (3 ГэВ), проект модернизации синхротрона SPring-8 II (6 ГэВ), а также лептонный коллайдер Super-KEKB.

Конфигурация установки представлена на рис. 2. Сгусток электронов формируется в форинжекторе, включающем в себя электронную пушку и секции, состоящие из нерегулярных ускоряющих ячеек. На выходе из форинжектора электроны с энергией ~10 МэВ попадают в основную (регулярную) часть линейного ускорителя, где ускоряются до максимальной энергии – 6 ГэВ. Далее электронный сгусток инжектируется в накопительное кольцо или (в промежутках между инжекциями в кольцевой накопитель) подается на

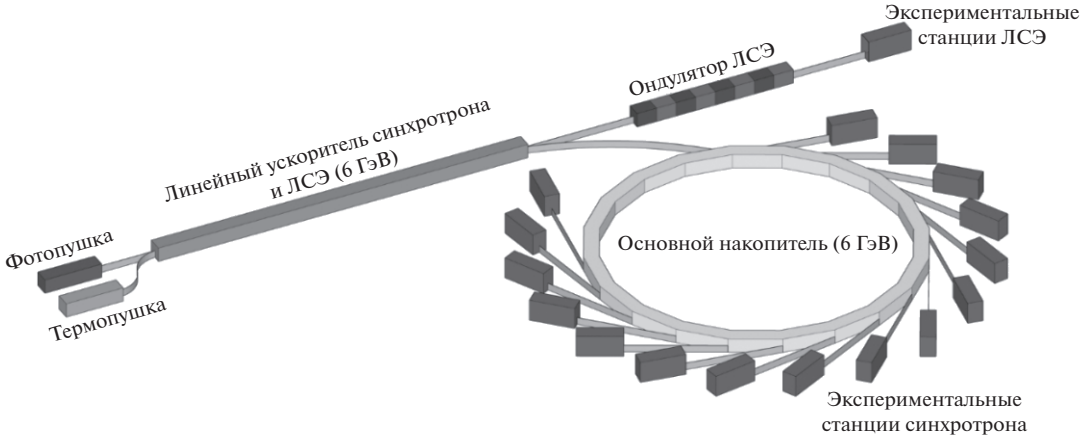


Рис. 2. Схема конфигурации с последовательным использованием ЛУЭ в качестве инжектора в накопительное кольцо синхротрона и драйвера для ЛСЭ.

одну из групп ондуляторов ЛСЭ. Требования к сгустку электронов для накопительного кольца и ондуляторов рентгеновского лазера существенно различаются, в связи с чем применяются два различных типа источников электронов (электронных пушек) для инжекции в накопительное кольцо и в ондуляторы ЛСЭ.

В состав форинжектора для накопительного кольца входят трехэлектродная термоэмиссионная пушка, клистронный предгруппирователь и адиабатический группирователь, включающий в себя несколько нерегулярных ускоряющих ячеек с нарастающей фазовой скоростью волны и амплитудой ускоряющего поля для продольной группировки пучка.

Второй форинжектор (для ЛСЭ) представляет собой классическую 3.5-ячеечную фотопушку с ускоряющей структурой на стоячей волне. Энергия на выходе должна составить ~10 МэВ [25–27]. Рассматриваются различные варианты фотокатода – металлический, полупроводниковый, алмазоподобный.

Ускоряющая структура регулярной части ЛУЭ состоит из 110 секций (длина каждой секции – 2.1 м), работающих на стоячей волне. Питание регулярных секций будет осуществляться независимо для каждой секции с одной задающей системой. Темп ускорения ограничен (400–420 кВ/см) максимальной мощностью клистронов российского производства, не превышающей 25 МВт, что обеспечивает прирост энергии ~50 МэВ на одну регулярную ускоряющую секцию. Предложенная структура обеспечивает эффективную инжекцию – позволяет минимизировать энергетический разброс пучка на выходе ЛУЭ и получить приемлемую величину поперечного эмиттанса, не превышающую нескольких нм рад [28]. Результаты разработок электродинамических макетов ускоряющих структур и численного моделирования динамики пучка представлены в [29].

Магнитные структуры типа “гибридный ахромат” с несколькими поворотными магнитами (**HMBA** – Hybrid Multi Bend Achromat) в настоящее время относятся к наиболее эффективным и современным решениям, которые применяются при проектировании накопительных колец и синхротронов [9]. Магнитная HBMA-структура позволяет минимизировать эмиттанс циркулирующих электронных пучков и тем самым улучшить “пользовательские” характеристики источника СИ, например яркость и пространственную когерентность. При разработке магнитооптической схемы источника “СИЛА” за основу была взята структура типа **H7BA** (Hybrid 7 Bend Achromat), предложенная и реализованная для источника СИ ESRF-EBS (Гренобль, Франция) [30], где гибридность достигнута применением диполей с градиентом индукции магнитного поля вдоль орбиты синхротрона и диполей с совмещенной квадрупольной функцией. Такое решение позволило получить пучки электронов в синхротроне ESRF-EBS с горизонтальным эмиттансом 132 пм рад. Расчеты показали, что, используя в качестве базовой магнитной структуры, аналогичной H7BA, ESRF-EBS ввиду отсутствия ограничения на величину периметра накопителя “СИЛА”, можно, уменьшив угол поворота пучка на одном регулярном суперпериоде за счет увеличения числа суперпериодов, добиться снижения равновесного значения горизонтального эмиттанса пучка ε_x до величины 70 пм рад [31]. Так как горизонтальный эмиттанс ε_x пропорционален энергии циркулирующих электронов во второй степени и обратно пропорционален числу суперпериодов в третьей степени, значение эмиттанса 70 пм рад при заданной энергии электронов в накопителе 6 ГэВ достигается при числе суперпериодов, равном 40, и периметре накопителя, близком к 1.1 км.

Главное отличие регулярного суперпериода накопителя “СИЛА” от классического H7BA со-

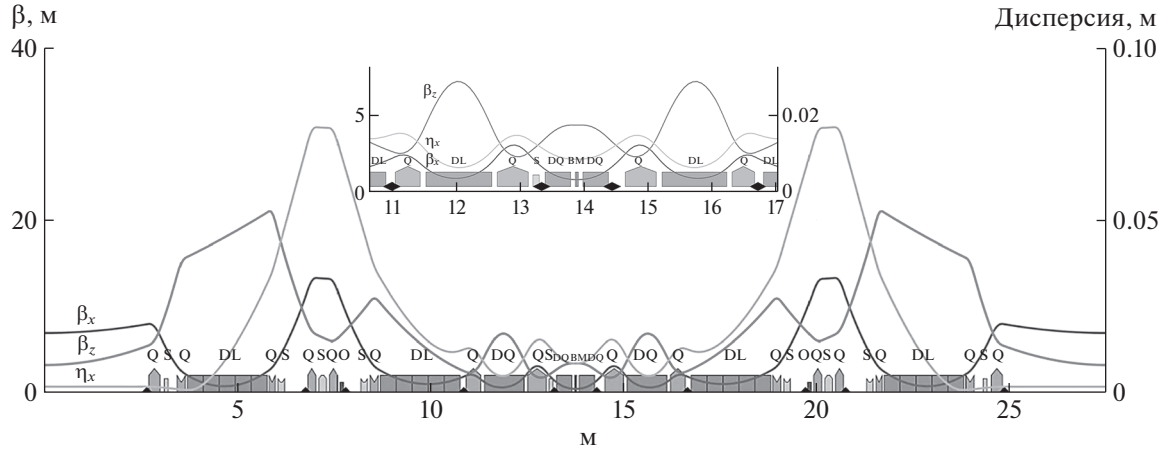


Рис. 3. Структура регулярного суперпериода источника “СИЛА”, разработанная на основе структуры типа H7BA [31], и его центральная часть с коротким поворотным магнитом в увеличенном масштабе (врезка). Дипольные магниты – DL, квадрупольные магниты – Q, диполь-квадрупольные магниты – DQ, секступольные магниты – S, октупольные магниты – O.

стоит в изменении его центральной части, а именно, в замене одного протяженного центрального дипольного магнита с квадрупольной функцией на два более коротких, между которыми дополнительно размещается короткий дипольный магнит-излучатель с полем 0.86 Тл, позволяющий получить пучок СИ с расходимостью 1 мрад. Такая модификация магнитной структуры позволяет удвоить число каналов вывода фотонов по отношению к классической H7BA. Рассчитанные оптические функции и магнитная структура регулярного суперпериода представлены на рис. 3 и 4. Оптические функции настроены таким образом, чтобы иметь необходимые значения эмиттанса в местах установки вставных устройств и обеспечивать большое значение динамической апертуры всего накопителя. Из 40 прямолинейных промежутков накопительного кольца источника “СИЛА” длиной ~5.3 м 34 предназначены для установки вставных устройств. Оставшиеся шесть прямолинейных промежутков являются “техническими”: два – для инжекции электронов из линейного ускорителя электронов, три – для размещения ВЧ-резонаторов и один – для размещения диагностического оборудования.

НАУЧНЫЕ ЗАДАЧИ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ СТАНЦИИ НАКОПИТЕЛЬНОГО КОЛЬЦА

В соответствии с разработанной конфигурацией ускорительно-накопительного комплекса “СИЛА” и проведенными расчетами установка будет обладать малым размером источника (порядка $\sigma_x\sigma_y$ ~ 6 × 20 мкм), высокой яркостью, высокой степенью когерентности и широким спектром – в диапазоне от умеренного до жесткого и сверхжесткого рентгеновского излучения. На рис. 5 представлены расчетные спектры излучения источника “СИЛА” для различных типов ондуляторов.

Создание “парка” синхротронных станций предполагается провести в два этапа. Основная задача создания станций первой очереди – широко представить и реализовать уникальные эксперименты, требующие высокой яркости и пространственной когерентности, малых пространственных размеров синхротронного пучка, а также экстремальной фокусировки: когерентная визуализация и дифракция [32], рентгеновская

Таблица 2. Параметры, используемые для расчета спектров, изображенных на рис. 7

Ондулятор	U14.4	U27	U42
Энергия электронов (Ee^-), ГэВ	6		
Ток пучка (I), мА	200		
Дисперсия по энергии ($\Delta E/E$), 10^{-3}	0.85		
Эмиттанс (ε_x), нм рад	75		
Бета-функция (β), м	6.8 × 2.9		
Период (λ_u), мм	14.4	27	42
Магнитное поле (B_{max}), Тл	1	0.556	0.834
Коэффициент ондуляторности (K_{max})	1.345	1.402	3.274
Число периодов	138	59	46
Длина ондулятора (L), м	1.987	1.593	1.932
Минимальная энергия излучения ($E_{1\,min}$), кэВ	12.469	6.386	1.281

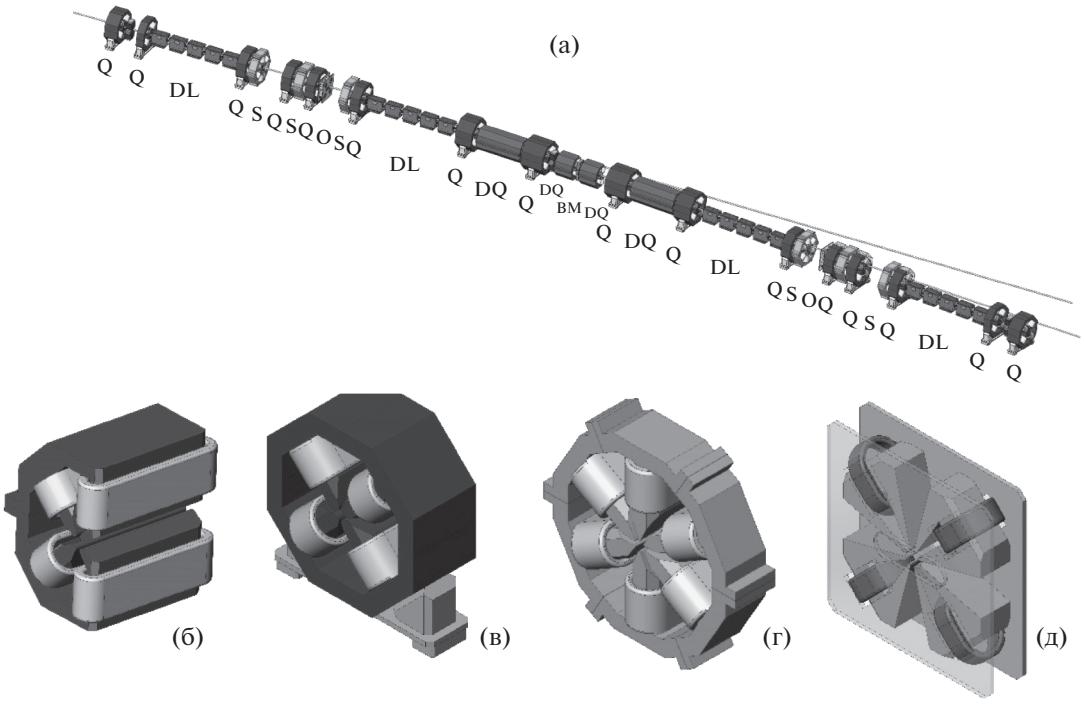


Рис. 4. Схематический вид периода магнитной структуры основного накопителя установки “СИЛА” (а) и эскизные чертежи отдельных магнитов: диполь-квадрупольного (б), квадрупольного (в), секступольного (г), октупольного (д).

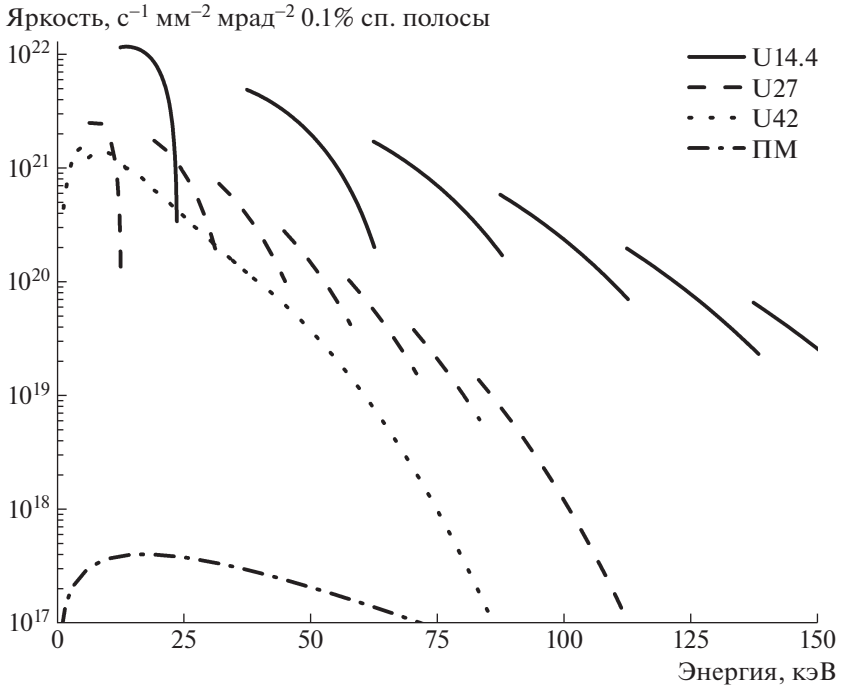


Рис. 5. Яркость излучения, генерируемого вставными устройствами (ондуляторами), параметры которых приведены в табл. 2, и поворотным магнитом-излучателем (ПМ) источника “СИЛА”.

голография [33], серийная кристаллография [34], экстремальные условия [35], фотон-корреляционная спектроскопия [36], нанодифракция [37], фотонная, электронная и ионная спектроскопия [38], поляризационные измерения. Такие эксперименты необходимы для исследования малых и

Таблица 3. Предварительный перечень экспериментальных станций первой очереди для источника “СИЛА”

Наименование станции	Направление исследований	Рабочий диапазон энергий, кэВ
Станция визуализации	Визуализация, фазовый контраст, микроскопия	10–300
Станция структурной кристаллографии	Порошковая и монокристальная дифракция	5–80
Станция исследования поверхностей и интерфейсов	Исследование структуры поверхности и интерфейсов, в том числе на поверхности жидкости	7–40
Станция малоуглового рассеяния	Мало- и широкоугловое рассеяние, рентгеновская фотон-корреляционная спектроскопия	5–25
Станция фотоэлектронной спектроскопии в жесткой рентгеновской области	Фотоэлектонная спектроскопия в жесткой области, фотоэлектронная спектроскопия в условиях, близких к естественным	2–20
Станция нанодифракции	Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия, в том числе с временным разрешением до долей микросекунд (наносекунд), стоячие рентгеновские волны	5–40
Станция когерентных приложений	Когерентная дифракционная визуализация, птихография, голография, нанофлуоресценция, рентгеновская полнополевая микроскопия	5–50
Станция магнитного рассеяния	Магнитное рассеяние, магнитный круговой дихроизм	0.5–2.5 и 2.5–30
Станция фотоэлектронной спектроскопии в мягкой области	Фотоэлектронная спектроскопия в мягкой рентгеновской области	0.2–2.0
Станция спектроскопии поглощения рентгеновского излучения	Рентгеновская спектроскопия в окрестности краев поглощения, в том числе с временным разрешением до милли- и микросекунд	5–50
Станция серийной кристаллографии	Макромолекулярная кристаллография; структурная биология; изучение динамики процессов, происходящих в молекулах белков; исследование кристаллов микроразмера методами серийной кристаллографии	5–20
Станция времяразрешающих методов и исследования быстропротекающих процессов	Рентгеновские методы с временным разрешением для экспериментов типа накачка–отклик	1.8–30

слабоупорядоченных систем, квантовых объектов, изучения тонкой динамики структуры и свойств материалов и устройств в режиме *in-operando* [39]. Особое внимание будет уделено разработке систем доставки нано- и микроскопических образцов: в виде жидкой струи, аэрозоля в газовой фазе или в нанокаплях гелия.

Также на первом этапе необходимо обеспечить решение текущих задач российского научного сообщества пользователей СИ, основанных на применении традиционных методов структурной диагностики, – рентгеновской спектроскопии, дифракции и рассеяния. К важным направлениям относятся, например, исследования в области структурной кристаллографии, рентгеновской диагностики поверхности, томографии и визуализации, рентгеновской оптики и рентгеноакустики [40–45].

Во вторую очередь будут создаваться лабораторные комплексы на базе экспериментальных станций, требующих особых условий для образцов, – для исследования опасных патогенов, радиоактивных и химически активных материалов и веществ. Для данных классов образцов предлагается использовать отдельные корпусы на выносных длинных каналах вывода излучения. Также на этом этапе будут создаваться технологические линии, спроектированные совместно с индустриальными партнерами, – специализированные станции, медицинские кабинеты для диагностики и лечения пациентов и многопрофильные станции, создаваемые в рамках работы международных консорциумов.

С учетом сформулированных требований разработан предварительный перечень экспериментальных станций первой очереди для источника “СИЛА” (табл. 3). Данный минимальный набор станций, с одной стороны, удовлетворяет основным потребностям российского сообщества пользователей, а с другой – дает возможность ис-

пользования уникальных свойств излучения, генерируемого источником четвертого поколения. Каждая экспериментальная станция требует для своего размещения нескольких выделенных помещений – специализированных отсеков ("хатчей", от английского *hutch*), окруженных биозащитой, в которых располагаются оптические элементы канала, системы прецизионного позиционирования образца в пучке, измерительная аппаратура.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В Российской Федерации создается не имеющий мировых аналогов источник СИ четвертого поколения с рентгеновским лазером на свободных электронах "СИЛА", который, несомненно, станет центром концентрации российского и мирового научного потенциала, эффективным инструментом развития критически важных научных направлений – основой создания прорывных технологий.

Обсуждаемые в работе технические решения по созданию ускорительно-накопительного комплекса и конфигурация магнитооптической системы разработаны с целью достижения рекордных для источников СИ с энергией 6 ГэВ параметров по яркости и энергетическому диапазону. Использование линейного ускорителя, работающего на полной энергии, позволит объединить в единой конфигурации, т.е. в единой научной инфраструктуре, ЛСЭ и многопользовательский источник СИ, что значительно расширит их исследовательские возможности.

Экспериментальный "парк" источника "СИЛА" будет включать в себя десятки научных станций мультидисциплинарного назначения: исследовательские, метрологические и медицинские станции, научные лаборатории, станции ЛСЭ, линии контроля технологических операций. За счет уникальных характеристик генерируемого излучения и большого числа экспериментальных станций источник "СИЛА" должен обеспечить исследовательские потребности научных и научно-производственных организаций всей России на десятки лет вперед. Для образовательных организаций откроются новые возможности по обучению, стажировке и подготовке специалистов широкого круга современных научных и инженерных специальностей. Также вузы получат возможность создавать и эксплуатировать выделенные для их нужд станции.

Участие Российской Федерации в международных проектах "мегасайенс", реализуемых за рубежом, таких как XFEL (Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах, г. Гамбург, Германия) и ESRF (Европейский центр синхротронных исследований, г. Гренобль, Франция), позволило приобрести уникальные компетенции и опыт, сформировать необходимый научно-технический и кадровый задел, получить доступ к определенным технологиям и техническим решениям, которые также послужили основой для разработки настоящего проекта.

Авторы выражают благодарность С.М. Полозову, В.С. Дюбкову, М.А. Лалаяну и другим сотрудникам каф. электрофизических установок НИЯУ МИФИ, выполняющим большую работу по технической реализации проекта – расчеты линейного ускорителя, расчет динамических параметров магнитной структуры и магнитостатические расчеты, расчет ВЧ-систем. Партнерство с НИЯУ МИФИ при реализации проекта "СИЛА" – важный элемент успеха всего проекта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. SPring-8. Encyclopedia of Synchrotron Radiation Facilities. 2nd Edition. 2020, RIKEN, Japan, Spring-8 Center. https://www.aps.anl.gov/spring-8-encyclopedia-of-synchrotron-radiation-facilities–2nd-edition
2. *Bilderback D., Kostroun V., Mills D. et al.* // Synchrotron Radiation News. 2015. V. 28. P. 48. https://doi.org/10.1080/08940886.2015.1059244
3. *Ковальчук М.В., Квардаков В.В., Корчуганов В.Н.* // Природа. 2013. № 12 (1180). С. 25.
4. *Filhol J.M., Hardy L., Weinrich U.* Status report of the ESRF, Proc. of the 1999 Particle Accelerator Conference, New York, USA (Cat. № 99CH36366). V. 4. P. 2334. https://doi.org/10.1109/PAC.1999.792682
5. *Кулипанов Г.Н.* // Успехи физ. наук. 2007. Т. 177. № 4. С. 384. https://doi.org/10.3367/UFNr.0177.200704f.0384
6. *Жуковский К.В.* // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 2017. № 2. https://doi.org/10.3103/S0027134917020126
7. *Винокуров Н.А., Левичев Е.Б.* // Успехи физ. наук. 2015. Т. 185. № 9. С. 917. https://doi.org/10.3367/UFNr.0185.201509b.0917
8. *Raimondi P.* Hybrid multiband achromat: From SuperB to EBS, Proc. of IPAC'17, Copenhagen, 2017, THPPA3, P. 3670. https://doi.org/10.18429/JACoW-IPAC2018-THXGBD3
9. *Einfeld D., Plesko M., Schaper J.* // J. Synchrotron Rad. 2014. V. 21. № 5. P. 856. https://doi.org/10.1107/S160057751401193X
10. *Kulipanov G., Skrinsky A., Vinokurov N.* // J. Synchrotron Rad. 1998. V. 5. Pt. 3. P. 176. https://doi.org/10.1107/S0909049597015306
11. *Bartolini R.* // ICFA Beam Dynamics Newsletter. 2012. V. 57. Ch. 3.1. https://icfa-usa.jlab.org/archive/newsletter/icfa_bd_nl_57.pdf
12. *Просеков П.А., Носик В.Л., Благов А.Е.* // Кристаллография. 2021. Т. 66. № 6. С. 843. https://doi.org/10.31857/S002347612106028X
13. *Ковальчук М.В., Благов А.Е.* // Кристаллография. 2022. Т. 67. № 5. С. 677. https://doi.org/10.31857/S002347612205006X

14. *Ковальчук М.В., Алексеева О.А., Благов А.Е. и др.* // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 1. С. 10. https://doi.org/10.1134/S0023476119010156

15. *Ковальчук М.В., Просеков П.А., Марченкова М.А. и др.* // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 5. С. 749. https://doi.org/10.7868/S0023476114050105

16. *Boikova A.S., Dyakova Y.A., Ilina K.B. et al.* // Acta Cryst. D. 2017. V. 73. P. 591. https://doi.org/10.1107/S2059798317007422

17. *Ковальчук М.В.* // Природа. 2013. № 12 (1180). С. 3. https://priroda.ras.ru/pdf/2013-12.pdf

18. *Иваненко Д.Д., Померанчук И.Я.* // Докл. АН СССР. 1944. Т. 44. С. 343.

19. *Векслер В.И.* // Докл. АН СССР. 1944. Т. 43. № 8. С. 346.

20. *Гинзбург В.Л.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1947. Т. 11. № 2. С. 165.

21. *Кондратенко А.М., Салдин Е.Л.* // ЖТФ. 1983. Т. 53. № 7. 1317.

22. *Liuzzo S., Carmignani N., Carver L.R. et al.* "USSR HMBA Storage Ring Lattice Options" Proc. of 12th International Particle Accelerator Conference, May 2021, Online, Brazil. TUPAB049. P. 1466. https://doi.org/10.18429/JACoW-IPAC2021-TUPAB049

23. *Hoummi L., Carmignani N., Carver L.R. et al.* "Optimization and Error Studies for the USSR HMBA Lattice" Proc. of 12th International Particle Accelerator Conference, May 2021, Online, Brazil. MOPAB224. P.730. https://doi.org/10.18429/JACoW-IPAC2021-MOPAB224

24. *Feldhaus J., Saldin E.L., Schneider J.R. et al.* // Opt. Commun. 1997. V. 140. P. 341. https://doi.org/10.1016/S0030-4018(97)00163-6

25. *Polozov S., Rashchikov V., Krasilnikov M.* An Improved Model for Photoemission of Space Charge Dominated Picosecond Electron Bunches: Theory and Experiment. Proc. of 12th International Particle Accelerator Conference, May 2021, Online, Brazil, WEPAB101, P. 2829. https://doi.org/10.18429/JACoW-IPAC2021-WEPAB101

26. *Kliuchevskaia Yu.D., Polozov S.M.* Optimization of the RF-Gun With Photocathode at Operating Frequency 2800 MHz for the New Injection Linac for USSR Project. Proc. of 27th Russian Particle Accelerator Conference, RuPAC'2021, TUPSB43, P. 319. https://doi.org/10.18429/JACoW-RuPAC2021-TUPSB43

27. *Polozov S.M., Rashchikov V.I.* // Cybernetics and Physics. 2020. V. 9. № 2. P. 103.

28. *Ashanin I.A., Kliuchevskaia Yu.D., Polozov S.M., Pronikov A.I.* Beam Dynamics Simulation in a Linear Electron Accelerator - Injector for the 4th Generation Specialized Synchrotron Radiation Source USSR. Proc. of 27th Russian Particle Accelerator Conference, RuPAC'2021, MOPSA08, P. 149. https://doi.org/10.18429/JACoW-RuPAC2021-MOPSA08

29. *Ашанин И.А., Ключевская Ю.Д., Полозов С.М. и др.* // Вестн. СПбГУ: Прикладная Математика. Информатика. Процессы управления. 2019. Т. 15. № 1. С. 126. https://doi.org/10.21638/11702/spbu10.2019.110

30. EBS Storage Ring Technical Report, ESRF, Grenoble, France, 2019. https://www.esrf.eu/files/live/sites/www/files/about/upgrade/documentation/Design%20Report-reduced-jan19.pdf

31. *Ashanin I.A., Bashmakov Yu.A., Budkin V.A. et al.* // Physics Atomic Nuclei. 2018. V. 81. № 11. P. 1646. https://doi.org/10.1134/S1063778818110030

32. *Miao J., Ishikawa T., Robinson I. et al.* // Science. 2015. V. 348. P. 530. https://doi.org/10.1126/science.aaa1394

33. *Лидер В.В., Ковальчук М.В.* // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 6. С. 764. https://doi.org/10.7868/S0023476113050068

34. *Spence J.C.H.* // Crystals. 2020. V. 10. № 2. P. 135. https://doi.org/10.3390/cryst10020135

35. *McMahon M.I.* // J. Synchrotron Rad. 2014. V. 21. P. 1077. https://doi.org/10.1107/S1600577514012855

36. *Shpyrko O.G.* // J. Synchrotron Rad. 2014. V. 21. № 5. P. 1057. https://doi.org/10.1107/S1600577514018232

37. *Shabalin A.G., Meijer J.-M., Vartaniants I. et al.* // PRL. 2016. V. 117. № 13. P. 138002. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.138002

38. *Sanchez A., Amini K., Wang S.-J. et al.* // Nat. Commun. 2021. V. 12. P. 1520. https://doi.org/10.1038/s41467-021-21855-4

39. *Yau A., Cha W., Kanan M. et al.* // Science. 2017. V. 356. P. 739. https://doi.org/10.1126/science.aam6168

40. *Куликов А.Г., Благов А.Е., Марченков Н.В. и др.* // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 107. № 9–10. С. 679. https://doi.org/10.7868/S0370274X18100119

41. *Элиович Я.А., Аккуратов В.И., Таргонский А.В. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 5. С. 708. https://doi.org/10.1134/S0023476118050090

42. *Blagov A.E., Kulikov A.G., Marchenkov N.V. et al.* // Experimental Techniques 2017. V. 41. № 5. P. 517. https://doi.org/10.1007/s40799-017-0194-1

43. *Проценко А.И., Благов А.Е., Писаревский Ю.В. и др.* // Успехи фин. наук. 2021. Т. 191. С. 88. https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.06.038779

44. *Благов А.Е., Просеков П.А., Таргонский А.В., Элиович Я.А.* // Кристаллография 2015. Т. 60. № 2. С. 189. https://doi.org/10.7868/S0023476115020058

45. *Благов А.Е., Ковальчук М.В., Кон В.Г. и др.* // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 1. С. 12.

EDN: BLLEEP
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 735–741

УДК 621.384.6

ПРОЕКТ КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ТРЕТЬЕГО ПОКОЛЕНИЯ

© 2022 г. В. Н. Корчуганов[1,*], А. Г. Валентинов[1], С. М. Полозов[2], А. С. Смыгачева[1], В. А. Ушаков[1], Е. А. Фомин[1], М. В. Ковальчук[1]

[1] Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия
[2] Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ" (Московский инженерно-физический институт), Москва, Россия
**E-mail: vnkorchuganov@mail.ru*

Поступила в редакцию 11.03.2022 г.
После доработки 11.04.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

В настоящее время в Национальном исследовательском центре "Курчатовский институт" приступили к реализации проекта модернизации источника синхротронного излучения. На базе существующей инфраструктуры взамен действующего источника – накопителя электронов с энергией 2.5 ГэВ и натуральным эмиттансом электронного пучка 98 нм рад – будет построен новый источник синхротронного излучения с энергией электронов 2.5 ГэВ и натуральным эмиттансом менее 3 нм рад. Для обеспечения "непрерывной" работы источника будет создан новый инжекционный комплекс, включающий в себя бустерный синхротрон, рассчитанный на энергию электронов 0.2–2.5 ГэВ (инжектор для основного кольца) и линейный ускоритель электронов (200 МэВ) – инжектор электронов для бустерного синхротрона с каналами транспортировки электронов ЭОК-1 (от линейного ускорителя до бустерного синхротрона) и ЭОК-2 (от бустерного синхротрона до большого накопителя). Дана концепция нового комплекса источника синхротронного излучения.

DOI: 10.31857/S0023476122050058

ВВЕДЕНИЕ

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

Компоновка действующего комплекса позволяет выводить пучок СИ равномерно по всему периметру основного накопителя. Имеются пучковые линии двух типов: для жесткого рентгеновского излучения из поворотных магнитов и вигглеров и для ультрафиолетового и мягкого рентгеновского излучения из слабополевых вставных устройств. Работа для обеспечения эксперимента проводится при энергии электронов 2.5 ГэВ и токе 100–200 мА. Время жизни электронов в накопителе составляет 20–40 ч.

Действующая магнитная структура (или структура магнитной системы) основного накопителя – это модифицированная структура типа двойного ахроматического поворота (DBA – Double Bend Achromat) [1, 2]. Она состоит из шести суперпериодов, каждый из которых содержит по два промежутка длиной 3 м для постановки сильнополевых сверхпроводящих вигглеров и ускоряющих высокочастотных резонаторов (промежутков с нулевой дисперсией), слабополевых вигглеров, элементов системы инжекции (промежутков с ненулевой дисперсией) [3–5].

Улучшение потребительских качеств пучков – яркости и интенсивности СИ – требует модернизации всего ускорительного комплекса и перевода основного накопителя в разряд источников третьего поколения с эмиттансом электронного пучка менее 5 нм·рад. Для этого необходимо помимо создания нового основного накопителя создать новый бустерный синхротрон (энергия 0.2–2.5 ГэВ, горизонтальный эмиттанс 44 нм рад, ток

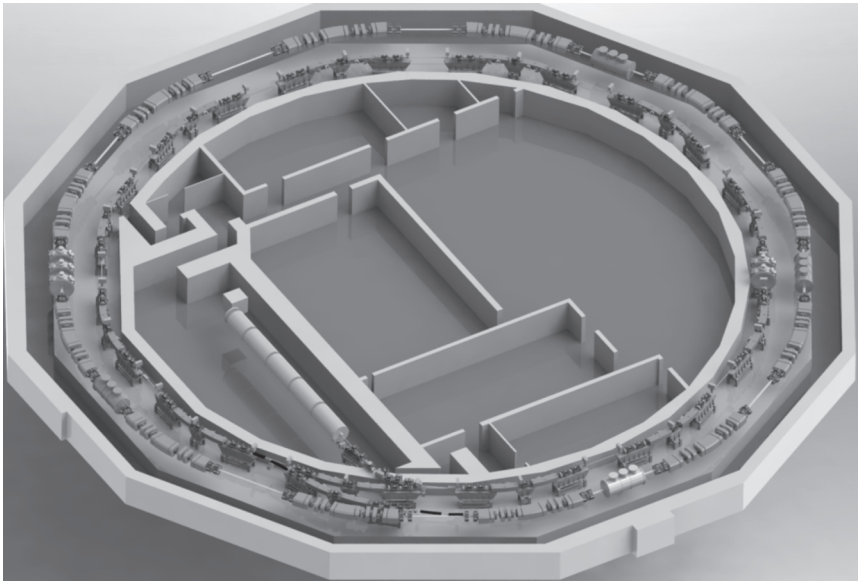


Рис. 1. Размещение ускорителей и транспортных каналов нового комплекса источника СИ в НИЦ “Курчатовский институт” на площадях имеющейся инфраструктуры.

10 мА, частота цикла 1 Гц) [6] и новый линейный ускоритель электронов (энергия 0.2 ГэВ, рабочая частота 2797 МГц, энергетический разброс электронов в пучке не более 1%) [13]. Кроме того, обязательным требованием к новому проекту является сохранение всех действующих в настоящее время осей каналов экспериментальных станций с высокой точностью установки координат и углов.

ПРОЕКТ МОДЕРНИЗАЦИИ КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИ

Современное развитие технологий в области создания магнитных, вакуумных, ВЧ-систем, компьютерного моделирования электромагнитных полей и динамики электронного пучка создали возможности для строительства источников СИ с использованием магнитных структур типа многократного ахроматического поворота (MBA – Multi Bend Achromat). При одних и тех же геометрических размерах накопителей благодаря более плотному расположению соседних элементов на кольце источника СИ, применению сложных и высокоточных магнитных элементов, малоапертурных вакуумных камер и вставных устройств, миниатюризации элементов диагностики, высокостабильным источникам питания появилась возможность достигать горизонтальных эмиттансов, почти на 2 порядка меньших, чем в структурах типа двойного ахроматического поворота. Первыми успешно реализованными проектами с магнитными структурами типа MBA являются проект MAX-IV [7] и проект модернизации ESRF – ESRF EBS [8]. Также заслуживают внимания проекты, находящиеся в различной стадии готовности – это проект SLS-2 [9] и самый амбициозный на сегодня – проект PETRA-IV [10], который использует идеи ESRF и наиболее близок к достижению дифракционно-ограниченного источника на длине волны 1 Å.

С учетом мирового опыта модернизации действующих источников СИ были сформулированы основные требования, предъявляемые к новой магнитной структуре Курчатовского источника СИ (**КИСИ**): сохранение всех экспериментальных станций; достижение эмиттанса электронного пучка менее 5 нм·рад; сохранение спектрального диапазона излучения; сохранение количества, длин и координат осей прямолинейных промежутков с нулевой дисперсионной функцией; обеспечение возможности инжекции электронного пучка из бустерного синхротрона; достижение времени жизни электронного пучка не менее 10 ч; сохранение периметра основного накопителя; удовлетворение технологическим ограничениям со стороны всех систем. Бустерный синхротрон будет размещен в одном и том же тоннеле концентрически внутри кольца источника СИ, а новый линейный ускоритель (0.2 ГэВ) размещен в так называемом малом зале на месте действующего линейного ускорителя (0.08 ГэВ) (рис. 1).

НОВАЯ МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА ИСТОЧНИКА СИ

КИСИ является одним из самых компактных в мире. Накопительное кольцо образовано шестью зеркально-симметричными суперпериодами. Для уменьшения эмиттанса в новой оптической структуре при сохранении геометрических разме-

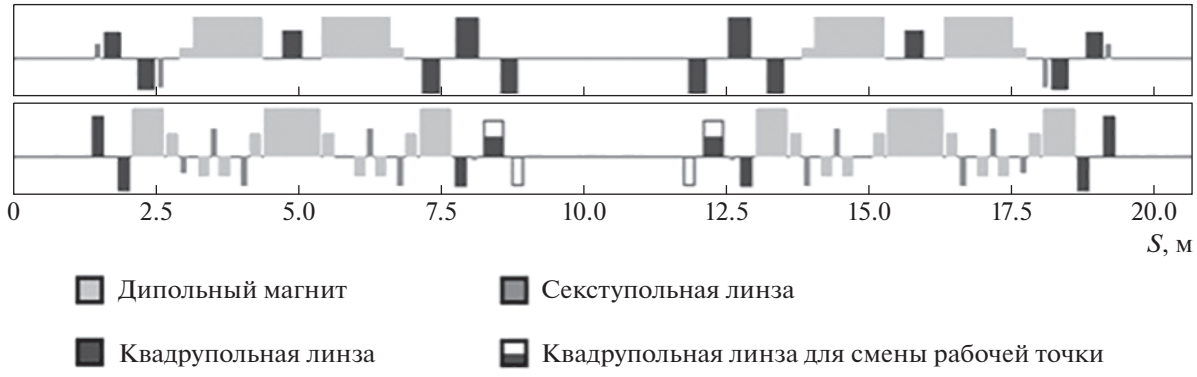


Рис. 2. Действующая (вверху) и новая (внизу) магнитная структура КИСИ.

ров накопителя эффективно использовать сэндвич-магниты и магниты с антиповоротом [11, 12]. Согласно проведенным исследованиям оптимальным вариантом является магнитная структура суперпериода, состоящая из двух модифицированных ячеек типа 3ВА, каждая ячейка 3ВА содержит три поворотных магнита (поле 2 Тл), четыре дипольно-квадрупольных магнита (магниты с совмещенными функциями, знак поля совпадает со знаком поля в диполях, тип 1), четыре дипольно-квадрупольных магнита с антиповоротом (магниты с совмещенными функциями, знак поля противоположен знаку поля в диполях, тип 2), один дублет и один триплет квадрупольных линз. Типы используемых магнитных элементов в новой и действующей структурах на длине одного суперпериода и их расположение показаны для сравнения на рис. 2.

Для того чтобы максимально минимизировать эмиттанс, в новой структуре пришлось отойти от жесткого выполнения некоторых требований к ней, а именно от точного сохранения периметра накопителя и сохранения положений прямолинейных промежутков. Выполнение этих требований не позволяет получить эмиттанс электронного пучка менее 10 нм рад. Для увеличения расстояния между элементами была увеличена индукция поля в поворотных магнитах от 1.7 до 2.0 Тл.

Отказ от жесткого выполнения этих требований вполне возможен. В настоящее время экспериментальные станции, работающие с пучками СИ из сверхпроводящих вигглеров, находятся на стадии строительства или модернизации. На данном этапе можно обеспечить их параллельный перенос на необходимое расстояние, а имеющаяся высокочастотная система позволяет обеспечить работу основного накопителя при изменении периметра вплоть до $\pm$100 мм. Увеличение индукции поля в поворотных магнитах естественным образом приведет к изменению спектральных характеристик излучения (оно станет более жестким), однако получаемые технологические упрощения конструкций магнитных элементов и расширение возможностей оптимизации и настройки магнитной структуры перевешивают. Характеристики действующей и новой структуры для сравнения приведены в табл. 1.

Использование в новой структуре магнитов с относительно большим антиповоротом позволяет, с одной стороны, существенно уменьшить эмиттанс электронного пучка, но, с другой стороны, приводит к существенному увеличению потерь электронами энергии на излучение и увеличению энергетического разброса. В отсутствие встраиваемых устройств имеющаяся ВЧ-система способна компенсировать потери энергии электронов в новой структуре в штатном режиме. Однако при включении всех вставных устройств (до девяти) работа ВЧ-системы с номинальным током 200 мА будет близка к пределу своих возможностей, и в этом случае может потребоваться переход на работу с меньшими токами электронного пучка. Оптические функции для новой структуры показаны на рис. 3.

В новой магнитной структуре в прямолинейных промежутках дисперсионная функция равна нулю. Поэтому промежутки могут быть использованы для постановки как слабополевых, так и сильнополевых вигглеров. Еще одна особенность структуры – близкие значения горизонтальной и вертикальной β-функций в прямолинейных промежутках. Это позволит при 100%-ной связи горизонтальных и вертикальных бетатронных колебаний обеспечить круглые пучки СИ, исходящих из встраиваемых устройств, и тем самым расширить экспериментальные возможности комплекса.

Достижение малых эмиттансов требует создания магнитооптических структур с более сильной фокусировкой, что приводит к увеличению натурального хроматизма и, как следствие, к увеличению сил секступольных линз, применяемых для его компенсации, к более сильному влиянию нелинейных компонент магнитного поля на движение электронов, и, как следствие, к появлению

Таблица 1. Основные параметры КИСИ до и после модернизации

Параметр	Действующий	Модернизированный
Энергия, ГэВ	0.45–2.5	2.5
Периметр, м	124.130	124.174
Количество суперпериодов	6	
Эмиттанс, нм рад	97.7	2.86
Энергетический разброс	0.95×10^{-3}	1.77×10^{-3}
Бетатронные частоты, ν_x/ν_y	7.788/6.696	14.853/6.755
Динамическая апертура, мм	±(20–30)	±(10–15)
Энергетический акцептанс, %	±2.5	–2.5/+3.5
Натуральный хроматизм, ξ_x/ξ_y	–16.7/–12.8	–29.3/–27.1
Потери энергии на оборот, кэВ	680.7	925.4
Критическая энергия фотонов из поворотных магнитов, кэВ	7.06	8.31
Времена затухания $\tau_x/\tau_y/\tau_s$, мс	3.172/3.041/1.490	0.955/2.238/3.404
Промежутки для вигглеров	5	9
Станции из магнитов	до 24	до 36

большого количества бетатронных резонансов и уменьшению размеров динамической апертуры.

Для компенсации натурального хроматизма, увеличения размера динамической апертуры и минимизации сдвига частот бетатронных колебаний в зависимости от амплитуд бетатронных колебаний и амплитуды отклонения импульса от равновесного значения было использовано шесть семейств хроматических линз и одно семейство гармонических линз (всего 84 секступольных линз). Силы всех секступольных линз были оптимизированы с целью минимизации влияния нелинейных эффектов на динамику электронного пучка. В отсутствие ошибок в размерах элементов магнитной структуры, возникающих при изготовлении, ошибок в величинах индукции магнитных полей в магнитных элементах и ошибок при их геодезическом позиционировании, размеры динамической апертуры, приведенные к центру промежутков с дублетами квадрупольных линз, следующие: вертикальный размер – ±12 мм, а горизонтальный – ±16 мм, что достаточно для осуществления инжекции электронного пучка. На рис. 4 показана расчетная динамическая апертура в центре промежутков с дублетами квадрупольных линз без учета ошибок в значениях индукции полей магнитных элементов, изготовлении, геодезическом позиционировании.

Смещение рабочей точки на диаграмме бетатронных частот в зависимости от амплитуды колебаний электронов внутри области поля ±11 мм по горизонтали и ±8 мм по вертикали не превышает ±0.015.

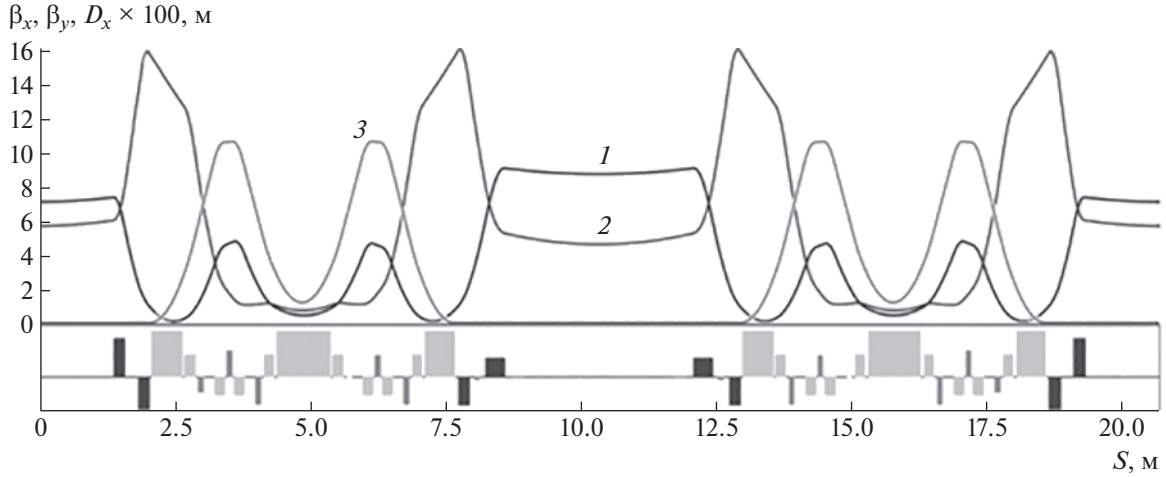


Рис. 3. Оптические функции на длине одного суперпериода.

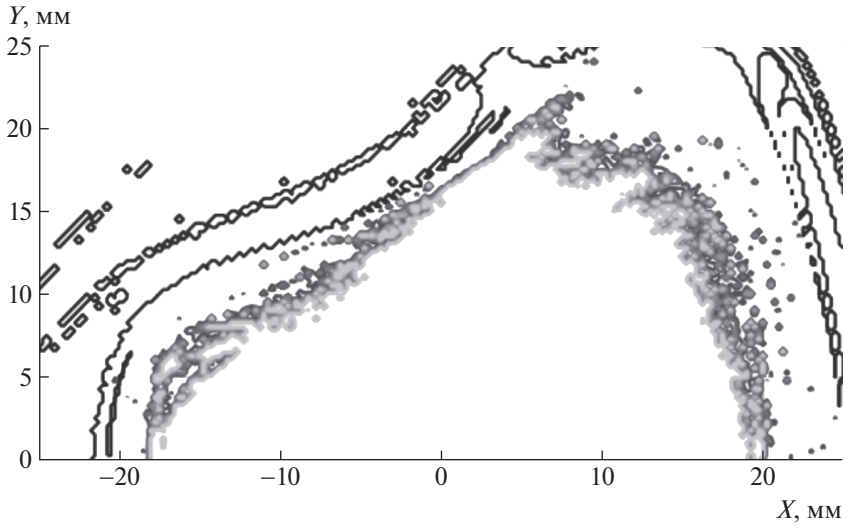


Рис. 4. Расчетная динамическая апертура без учета ошибок.

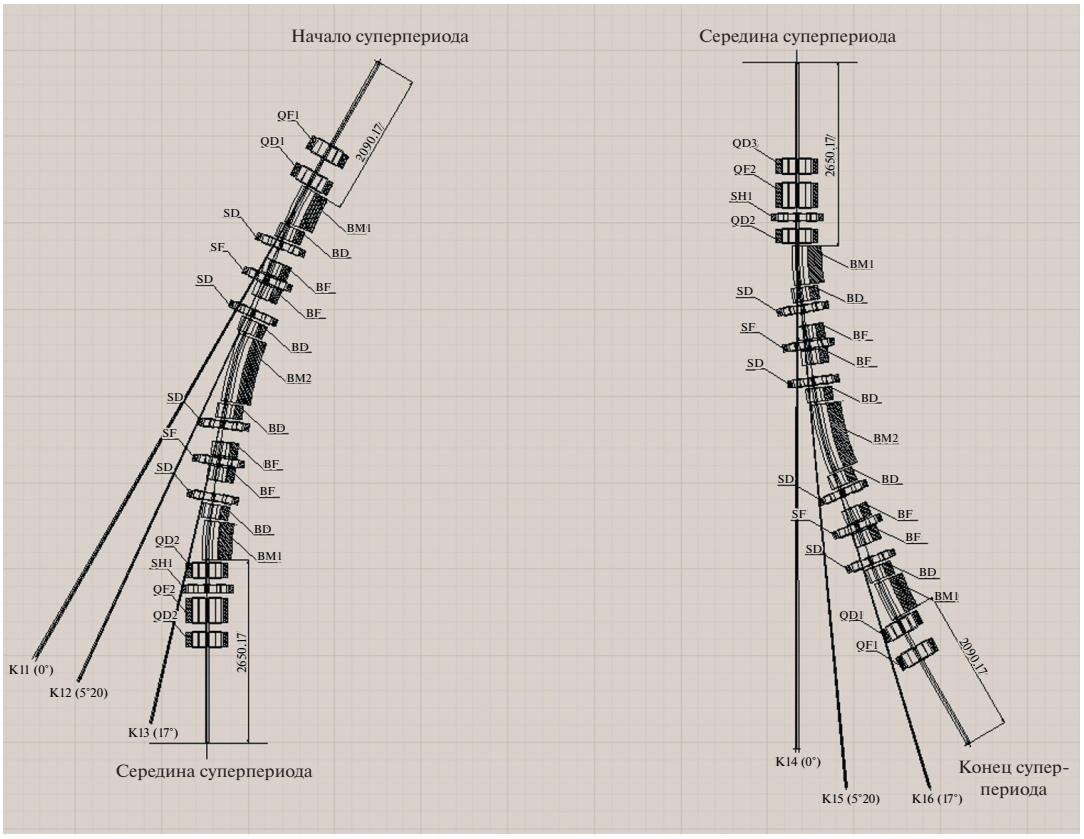


Рис. 5. Вывод излучения из поворотных магнитов (углы 5°20′ и 17°) и вставных устройств (углы 0°) одного суперпериода нового источника СИ.

Результаты моделирования показывают, что при среднеквадратичной ошибке позиционирования магнитных элементов 50 мкм динамическая апертура уменьшается в среднем до ±10 мм, а искажения замкнутой орбиты достигают 5 мм в обеих плоскостях. Но уже при включении коррекции динамическая апертура восстанавливается практически до исходного размера в отсутствие ошибок, а искажения замкнутой орбиты не превышают размера электронного сгустка.

На рис. 5 приведена схема вывода каналов излучения из нового источника СИ. В соответствии

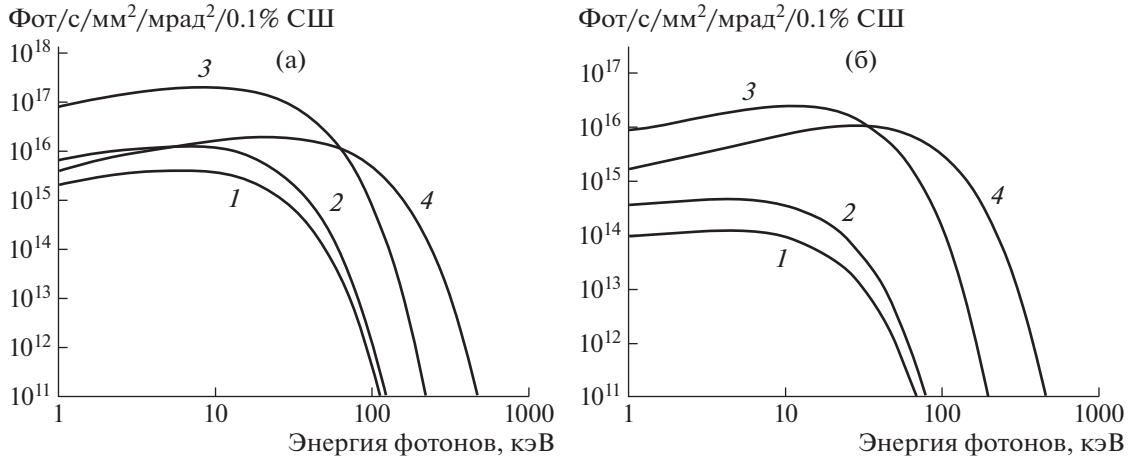


Рис. 6. Сравнение спектральной яркости СИ из различных устройств в новой (а) и действующей (б) структурах КИСИ при токе электронов 200 мА: *1*, *2* – поворотные магниты; *3* – сверхпроводящий вигглер (3 Тл, 50 + 4 полюса); *4* – сверхпроводящий вигглер (7.5 Тл, 19 + 2 полюса). СШ – спектральная ширина.

с увеличением числа поворотных магнитов количество экспериментальных станций, работающих с пучками СИ и выведенных из поворотных магнитов, можно увеличить в 1.5 раза.

Новая магнитная структура обеспечивает существенное повышение качества фотонного пучка, излучаемого всеми установленными на кольце источниками. Главным образом это улучшение проявляется в увеличении яркости излучения в 30–50 раз. Для иллюстрации на рис. 6 приведены графики спектральных характеристик СИ, генерируемого существующими сверхпроводящими вигглерами в действующей и новой структурах.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Расчетная магнитооптическая структура нового источника СИ в Курчатовском институте обеспечит в ~30–50 раз меньший натуральный эмиттанс, что позволит добиться параметров пучков СИ (яркости и интенсивности) на уровне источников третьего поколения. Для успешной реализации проекта уделяют пристальное внимание разработке и оптимизации магнитных элементов источника СИ, которые должны быть выполнены и установлены на свои места с высокой точностью. В настоящее время продолжаются работы, связанные с электрическими, магнитными и механическими расчетами магнитовакуумной системы основного накопителя – источника СИ. Геометрия малоапертурной вакуумной камеры требует тщательной проработки с учетом малых апертур и излучения, генерируемого магнитами с антиповоротами. Особое значение имеет оптимальное размещение элементов вакуумной откачки и охлаждения вакуумной камеры (приемников СИ), локальной защиты элементов, находящихся внутри вакуумной камеры (диагностика), от излучения, расположение и сопряжение фронтендов (переходных частей от вакуумной камеры накопителя к каналу вывода СИ) с вакуумной камерой. Немаловажным является вопрос долговременной стабилизации температуры воздуха в туннеле основного накопителя с учетом периодически работающего бустерного синхротрона.

Электромагнитные расчеты и оптимизация геометрии всех магнитных элементов бустерного синхротрона закончены. Разработаны технические задания ко всем магнитным элементам, достаточные для начала работ по разработке конструкторской документации с учетом закладываемой технологии для производства магнитов бустерного синхротрона. Основные узлы ВЧ-систем для основного накопителя и бустерного синхротрона определены и находятся в стадии производства.

Спроектирована структура линейного ускорителя электронов с энергией 200 МэВ. Определены оптимальные параметры резонансной ускоряющей структуры с высоким импедансом и необходимая система СВЧ-питания. Для этого были проведены работы по оптимизации электронной пушки, ячеек ускоряющих секций ускорителя, предгруппирователей, элементов СВЧ-тракта и выполнено математическое моделирование динамики электронного пучка в ускорителе. Показано, что для достижения проектной энергии 200 МэВ ускоритель должен включать в себя четыре регулярные ускоряющие секции длиной ~2 м каждая с градиентом ускоряющего поля ~420 кВ/см, что обеспечит прирост энергии ~50 МэВ на секцию. Секция представляет собой биперiодическую ускоряющую структуру, рабо-

тающую на стоячей волне и включающую 40 ускоряющих ячеек и 39 ячеек связи. Коэффициент токопрохождения от выхода электронной пушки до выхода четвертой регулярной секции 54% [13]. Энергетический спектр пучка после оптимизации составляет ±0.9% ширины на полувысоте, выходной поперечный эмиттанс ~0.15 мм мрад.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-29-12039).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Chasman R., Green G.K.* Design of a National Dedicated Synchrotron Radiation Facility. OSTI 7334216, 1976.
2. *Chasman R., Green G.K., Rowe E.M.* // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1975. V. NS-22. № 3. P. 1765.
3. *Корчуганов В.Н.* Дис. “Разработка и создание специализированных источников СИ”... д-ра физ.-мат. наук. Новосибирск, ИЯФ, 2001.
4. *Anashin V.V., Valentinov A.G., Veshcherevich V.G. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 1989. V. 282. P. 369.
5. *Валентинов А.Г., Воблый П.Д., Михайлов С.Ф. и др.* Магнитная система накопителя Сибирь-2 – специализированного источника СИ. Препринт ИЯФ 89-174, 1989.
6. *Смыгачева А.С., Корчуганов В.Н., Фомин Е.А.* // Прикладная физика. 2021. № 5. С. 99. https://doi.org/10.51368/1996-0948-2021-5-99-105
7. MAX-IV Conceptual Design Report. MAX-lab.
8. ESRF Upgrade Program Phase II (2015–2022) Technical Design Study. ESRF, 2014.
9. SLS-2 Conceptual Design Report. PSI-Bericht, 2017.
10. *Agapov I., Brinkmann R., Chae C. et al.* 60th ICFA Advanced Beam Dynamics Workshop on Future Light Sources, Shanghai, China, 2018. P. 12. https://doi.org/10.18429/JACoW-FLS2018-MOP1WB01
11. *Fomin Ye., Korchuganov V.* Proc. 26th Russ. Particle Accelerator Conf. Protvino, 2018. P. 84. https://doi.org/10.18429/JACoW-RUPAC2018-WEZMH02
12. *Левичев Е.Б.* // Успех физ. наук. 2018. Т. 188. № 1. С. 31.
13. *Ashanin I.A., Polozov S.M., Pronikov A.I. et al.* Proc. 27th Russ. Particle Accelerator Conf. Alushta, 2021. P. 145. https://doi.org/10.18429/JACoW-RuPAC2021-MOP-SA07

EDN: NPQURZ
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 742–765

УДК 621.384.639

ЦЕНТР КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ “СИБИРСКИЙ КОЛЬЦЕВОЙ ИСТОЧНИК ФОТОНОВ” (ЦКП “СКИФ”)

© 2022 г. А. В. Бухтияров[1,3,4], В. И. Бухтияров[4], А. Н. Журавлев[1,2], К. В. Золотарев[1,2,3], Я. В. Зубавичус[1,3,4], Е. Б. Левичев[1,2,*], Н. А. Мезенцев[1,2], А. Д. Николенко[1,2], П. А. Пиминов[1,2], И. Н. Чуркин[2]

[1] ЦКП “СКИФ”, Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия

[2] Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

[3] Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

[4] Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

*****E-mail: E.B.Levichev@inp.nsk.su*

Поступила в редакцию 11.04.2022 г.
После доработки 11.04.2022 г.
Принята к публикации 16.04.2022 г.

Представлены основные технические решения, выбранные для реализации проекта источника синхротронного излучения четвертого поколения ЦКП “СКИФ”, сооружаемого в настоящее время в г. Новосибирске. Описан выбор конфигурации и параметров источника синхротронного излучения, рассмотрены принципы формирования научной программы, обсуждаются устройства генерации излучения, конструкция каналов вывода излучения, инженерная инфраструктура.

DOI: 10.31857/S0023476122050022

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение

1. Базовые принципы формирования научной программы ЦКП “СКИФ”

2. Ускорительный комплекс ЦКП “СКИФ”

2.1. Конфигурация комплекса и магнитная структура накопителя

2.2. Основные аспекты динамики источника СИ СКИФ

2.3. Основные технические системы источника СИ СКИФ

2.3.1. Система инжекции

2.3.2. Магнитная система накопителя СКИФ

2.3.3. Вакуумная система накопителя СКИФ

2.3.4. Ускоряющие резонаторы ЦКП “СКИФ”

3. Устройства генерации излучений и фронтенды для вывода СИ

3.1. Устройства генерации излучений

3.2. Фронтенды и каналы вывода СИ для станций первой очереди

4. Инженерно-строительная инфраструктура ЦКП “СКИФ”

Заключение

ВВЕДЕНИЕ

В феврале 2018 г. В.В. Путин, проводя заседание Совета по науке при Президенте РФ в Новосибирском Академгородке, одобрил инициативу сибирских ученых по созданию здесь современного источника синхротронного излучения (**СИ**). Параметры новой установки были утверждены в октябре 2019 г. на заседании Совета Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры. Государственным заказчиком (застройщиком) нового научного комплекса класса “большая наука” Правительством РФ был определен Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, а сам источник СИ получил наименование Центр коллективного пользования “Сибирский кольцевой источник фотонов” (**ЦКП “СКИФ”**).

Государственный контракт на проектно-изыскательские работы был заключен в апреле 2020 г. с АО “Центральный проектно-технологический институт”, входящим в компанию “ТВЭЛ” госкорпорации “Росатом”, и в конце 2021 г. по результатам работы АО “ЦПТИ” было получено положительное заключение ФАУ “Главгосэкспертиза России” на проектно-сметную документацию ЦКП “СКИФ”. Генеральным подрядчи-

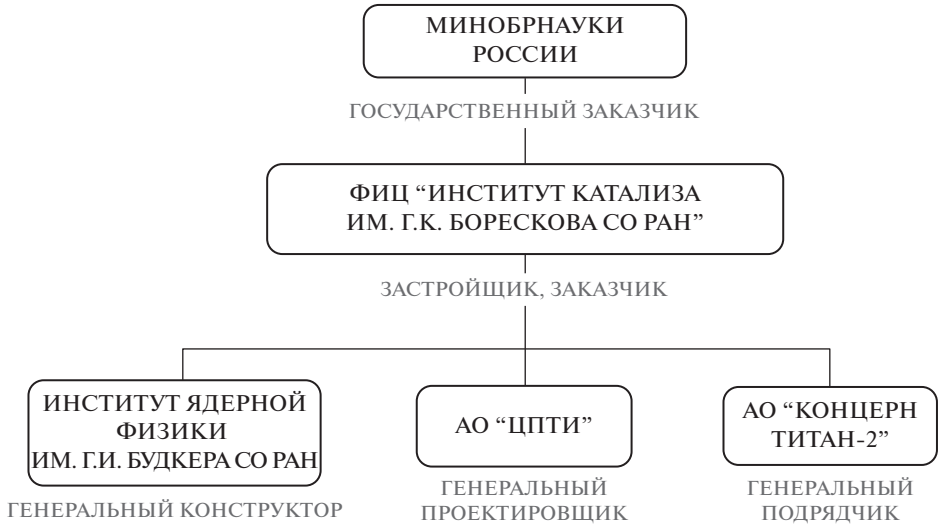


Рис. 1. Организационная диаграмма реализации проекта источника СИ ЦКП "СКИФ".

ком уникального проекта был выбран АО "КОНЦЕРН ТИТАН-2".

С ноября 2021 г. в Институте ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН активно ведутся разработка, проектирование и изготовление оборудования ускорительного комплекса ЦКП "СКИФ". Организационная диаграмма исполнения проекта ЦКП "СКИФ" показана на рис. 1.

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 и накопительного кольца. Накопитель релятивистских электронов с энергией 3 ГэВ, периметром 476 м и сверхмалым расчетным горизонтальным эмиттансом 73.2 пкм·рад (без учета токовых эффектов, связи бетатронных колебаний и вставных устройств) будет поставлять пучки СИ с предельной яркостью в диапазоне от 100 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 и расширяя потенциал исследовательского комплекса.

В предлагаемом обзоре обсуждаются различные аспекты реализации ЦКП "СКИФ", включая ускорительно-накопительный комплекс, источники излучения, пользовательскую и инженерную инфраструктуры.

1. БАЗОВЫЕ ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ НАУЧНОЙ ПРОГРАММЫ ЦКП "СКИФ"

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", схематично показанные на рис. 2. Из соображений безопасности и экспериментальных особенностей часть оборудования станций 1-3 "Быстропротекающие процессы" и 1-5 "Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне" вынесена в отдельные здания.

Источник ЦКП "СКИФ" после выхода на проектные параметры будет работать в режиме 24 × 7, за исключением периодов планово-профилактических работ. Прогнозируемое время работы ускорительного комплекса для пользователей составляет до 6500 ч в год. Доступ пользовательских групп к секциям станций первой очереди будет предоставлен по мере их ввода в эксплуатацию. Всего в состав ЦКП "СКИФ" может войти до 30 экспериментальных станций, 14 станций будут использовать излучение специальных многополюсных магнитных устройств генерации (вигглеров и ондуляторов) в прямолинейных промежутках, а 16 будут размещены на каналах вывода из поворотных магнитов.

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. Инфраструктура ЦКП "СКИФ" будет использована для выполнения исследований мирового уровня в различных областях физики,

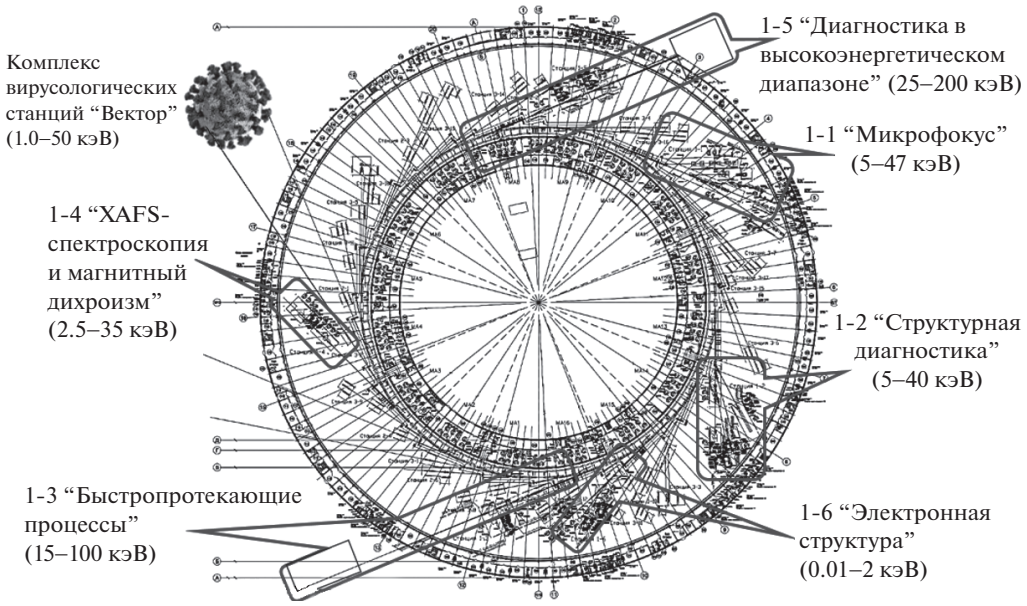


Рис. 2. Схема размещения первых шести экспериментальных станций в здании основного накопителя ЦКП “СКИФ”. Показана вирусологическая станция “Вектор”, рассматриваемая дополнительно.

химии, материаловедения, молекулярной биологии, медицины и других дисциплин с акцентом на наиболее прорывные, экономически и социально-значимые мультидисциплинарные задачи.

В области фундаментальных наук приоритетными направлениями деятельности ЦКП “СКИФ” являются: развитие научных основ создания новых материалов с заданными свойствами (включая композитные и гибридные) на основе знания их структуры; исследование механизмов функционирования живых систем, в том числе развитие бионических подходов к дизайну технических систем; развитие методологии синхротронной диагностики для эффективной реализации инновационных технологических цепочек “от идеи к коммерческому продукту”; развитие экспериментальной аппаратуры и методик обработки больших данных, в том числе для исследования ударно-волновых воздействий на вещества и материалы; структурный дизайн новых лекарственных средств для борьбы с социально значимыми заболеваниями, развитие методов медицинской диагностики и терапии; моделирование геологических и геофизических процессов в недрах Земли и планет; поиск решений глобальных экологических проблем, включая исследования материалов для альтернативной энергетики (водородной, солнечной, термоядерной).

В области поисковых и прикладных исследований в интересах организаций реального сектора экономики приоритетными направлениями деятельности ЦКП “СКИФ” будут: исследования новых функциональных материалов с целью оптимизации их эксплуатационных характеристик и создания на их основе высокотехнологичных устройств (сверхпроводимость, молекулярная электроника, спинтроника, топливные элементы, аккумуляторы, промышленные катализаторы, полимеры и композиты); медико-биологические исследования (поиск новых фармацевтических препаратов белковой природы, разработка новых систем целевой доставки лекарственных препаратов, исследования физиологического отклика на терапевтическое вмешательство методами “рентгеновского кино”, исследования в области нейрофизиологии и когнитивных процессов, развитие технологий биосовместимых материалов для протезирования); развитие новых технологий обработки конструкционных материалов (электронная и лазерная сварка, аддитивные, ионно-плазменные технологии), формирования защитных износо-, коррозионно- и термостойких покрытий.

Особое внимание в рамках реализации программы прикладных исследований ЦКП “СКИФ” будет уделено внедрению научных результатов в реальный сектор экономики (нефтегазовая промышленность, экологический катализ, фармацевтика, машиностроение, добыча и переработка минерального сырья и другие).

Важной частью научной программы ЦКП “СКИФ” будет решение стратегических задач, связанных с обеспечением национальной безопасности и повышением обороноспособности России. Работы будут осуществляться в интересах предприятий Государственной корпорации “Росатом”, Российских федеральных ядерных центров – Всероссийского научно-исследователь-

ского института технической физики им. академика Е.И. Забабахина (г. Снежинск) и Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики (г. Саров) совместно с Институтом гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН (г. Новосибирск), Институтом теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (г. Новосибирск): выявление кинетических параметров и химических механизмов быстрых и сверхбыстрых неравновесных процессов (взрыв, фронт горения, ударная волна, мощное импульсное лазерное воздействие); структурная диагностика конструкционных материалов, предназначенных для работы в экстремальных условиях (авиастроение, космос, материалы для атомной и термоядерной энергетики); анализ механизмов разрушения и деградации (развитие напряжений, циклические деформационные нагрузки, усталостное разрушение, возникновение трещин, трение и износ, радиационное охрупчивание, коррозия) с целью повышения их эксплуатационных характеристик; повышение радиационной стойкости элементной базы и изделий микроэлектроники для критических приложений (космос, атомная и термоядерная энергетика); повышение удельной энергонасыщенности материалов и композитов.

Будет реализована обширная программа, нацеленная на обеспечение национальной биологической безопасности, в частности связанная с исследованиями объектов высокой степени патогенности, нацеленная на ускоренную разработку новых высокоэффективных вакцин, антибактериальных и антивирусных препаратов, совместно с ФБУН ГНЦ ВБ “Вектор” Роспотребнадзора (Кольцово).

Совместно с ведущими сибирскими вузами, включая Новосибирский государственный, Новосибирский государственный технический университеты, Томский государственный, Томский политехнический университеты, Сибирский федеральный, Сибирский государственный университеты и другие, будут реализованы программы подготовки научных и инженерно-технических специалистов высокой квалификации с использованием самой передовой исследовательской инфраструктуры, нацеленной на получение результатов мирового уровня. Студенты инженерного профиля будут привлечены к проектированию нового оборудования синхротронных станций для наиболее быстрого и эффективного внедрения в практику.

Решение задач, поставленных перед научным коллективом ЦКП “СКИФ”, окажется невозможным без предельного уровня информатизации и интеллектуализации процессов получения новых научных знаний на этой установке с широким использованием технологий искусственного интеллекта в цепочках управления данными с целью быстрого получения конечных результатов исследования.

Текущая оценка потребностей в ИТ-ресурсах центра обработки данных экспериментальных станций и прогноз их роста выглядят следующим образом: вычислительная производительность кластера к моменту ввода ЦКП “СКИФ” в эксплуатацию – не менее 200 терафлопс на базе CPU-вычислителей и не менее 500 терафлопс на базе GPU-ускорителей с ростом до 8 петафлопс к 2030 г.; суммарная скорость поступления “сверхгорячих” первичных “сырых” экспериментальных, пропускная способность каналов обмена информации с вычислительными узлами 128 ГБ/с (рост до 200 к 2030 г.); объем “сверхгорячих” детекторных экспериментальных данных для кратковременного хранения – 240 ТБ в сутки (рост до 1.5 ПБ к 2030 г.); объем долговременного “теплого” хранения экспериментальных данных – 4 ПБ в год (рост до 80 ПБ к 2030 г.).

2. УСКОРИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ЦКП “СКИФ”

Источниками СИ (циклическими) служат накопители электронов с характерной энергией несколько гигаэлектронвольт и длиной орбиты до 1–2 км. В таких установках интенсивные (ток несколько сотен миллиампер) пучки заряженных частиц, обладающие очень малым фазовым объемом – эмиттансом, двигаясь в поперечном магнитном поле, создают мощное и яркое излучение, которое по каналам вывода поступает на большое число экспериментальных станций для проведения исследований.

Важными “потребительскими” характеристиками источника СИ являются яркость и когерентность излучения. Чем больше яркость и когерентная фракция потока фотонов, тем выше “качество” установки и тем больший интерес она представляет для исследователей.

Яркость определяется как поток фотонов, нормированный на единицу площади и телесного угла источника. В идеальной оптической системе яркость сохраняется, поэтому ее удобно использовать в качестве критерия при построении схемы эксперимента. Как правило, для измерений нужен узкий диапазон спектра СИ $\Delta\lambda$ в окрестности длины волны λ, который вырезает монохроматор, поэтому удобно определить спектральную яркость как

$$B \sim \frac{\dot{N}(\lambda)}{\Sigma_x \Sigma_{x'} \Sigma_y \Sigma_{y'} (\Delta\lambda/\lambda)}, \qquad (1)$$

где $\dot{N}$ – число фотонов в единицу времени (поток), а $\Sigma_{x,y}$ и $\Sigma_{x',y'}$ – эффективные пространственный и угловой размеры источника излучения по

горизонтали и вертикали, учитывающие вклад и электронного, и фотонного пучков.

Поперечный среднеквадратичный размер $\sigma_{x,y}$ и угловая расходимость пучка электронов $\sigma_{x',y'}$ определяют фазовый объем – эмиттанс – согласно $\varepsilon_{x,y} = \sigma_{x,y}\sigma_{x',y'}$, и из (1) следует, что для повышения яркости источника СИ эмиттанс пучка электронов необходимо уменьшать. Однако волновой характер излучения накладывает ограничение на пространственный Δx и угловой $\Delta\psi$ размеры источника с длиной волны λ согласно $\Delta x \sim \lambda/\Delta\psi$ [1]. Это значит, что даже в случае точечного электрона эмиттанс ограничен дифракционными эффектами на уровне $\varepsilon_r \approx \Delta x \Delta\psi \sim \lambda$. Более точно в случае излучения одиночного электрона в ондуляторе длиной L среднеквадратичный размер и расходимость источника излучения записываются как [2]:

$$\sigma_r = \frac{\sqrt{2\lambda L}}{4\pi}, \quad \sigma_{r'} = \sqrt{\frac{\lambda}{2L}}, \tag{2}$$

где λ – длина волны излучения ондулятора на оси, и радиационный фазовый объем такого источника

$$\sigma_r\sigma_{r'} = \lambda/4\pi. \tag{3}$$

Таким образом, накладывается естественный предел на величину эмиттанса электронного пучка в циклическом источнике СИ – не имеет смысла делать его меньше (3), поскольку рост яркости будет незначительным, а сложность сооружения источника возрастает в высокой степени. Поскольку волновой эмиттанс зависит от длины волны излучения, для оценки обычно берут наиболее востребованный пользователями диапазон от $\lambda \sim 10$ Å (мягкий рентген), что дает $\varepsilon_r \sim 100$ пкм·рад, до $\lambda \sim 1$ Å (жесткий рентген) с $\varepsilon_r \sim 10$ пкм·рад.

Предельно малый эмиттанс позволяет получить излучение с высокой степенью пространственной когерентности, которая для пучка из ондулятора определяется как

$$\zeta = \frac{\varepsilon_r^2}{\Sigma_x\Sigma_{x'}\Sigma_y\Sigma_{y'}}.$$

Использование когерентного излучения позволяет расширить исследовательские возможности установки.

Одним из важнейших факторов, определивших конфигурацию и параметры источника СИ “СКИФ”, является очень короткий срок, отведенный на реализацию проекта, что заставляет уменьшать как размер установки, так и объем работ по расчету, проектированию, прототипированию, изучению и доработке оборудования комплекса, поскольку на это просто нет времени. В связи с этим мы вынуждены максимально применять предыдущие разработки Института ядерной физики (**ИЯФ**), по которым есть опыт, проектная и конструкторская документация, производственное оборудование и приспособления. Было принято решение использовать в качестве основных установок инжекционного комплекса линейный ускоритель электронов с энергией 200 МэВ, аналогичный линаку ВЭПП-5 [3] – инжектору электронно-позитронных коллайдеров ИЯФ, и бустерный синхротрон [4], который был разработан и изготовлен в ИЯФ для проекта источника СИ NSLS II. При учете изложенных выше соображений, пожеланий экспериментаторов, размеров участка для размещения источника СИ, оптимизации бюджета и графика реализации были сформулированы следующие исходные требования к источнику СИ ЦКП “СКИФ”: энергия пучка 3 ГэВ; периметр накопителя менее 500 м; натуральный эмиттанс менее 100 пкм·рад; инжектор (разработка ИЯФ) – бустер-синхротрон источника СИ NSLS II и линейный ускоритель, который используется в ИЯФ для инжекции в e^+–e^--коллайдеры; достаточное число каналов вывода СИ из ондуляторов и вигглеров, а также из поворотных магнитов с “большим” полем (жесткий рентген) и с “малым” полем (мягкий рентген и ультрафиолет); по возможности простые, проверенные и надежные решения (например, отказ от сложных магнитов с продольным градиентом поля, традиционная инжекция с горизонтальным отклонением накопленного пучка (bump) импульсными магнитами на азимуте инжекции).

Эти требования легли в основу разработки ускорительного комплекса. “СКИФ” может работать в односгустковом (с током до 20 мА) или многосгустковом (с током пучка до 400 мА) режимах и обслуживать до 30 экспериментальных станций. На накопителе предполагается установить до 14 специальных генераторов излучения – вигглеров и ондуляторов (в том числе сверхпроводящих), которые значительно улучшают спектральные характеристики источника СИ. С учетом тока пучка, бетатронной связи и вставных устройств эмиттанс может быть дополнительно уменьшен до ~50–60 пкм·рад, что позволит достичь волнового предела в востребованной экспериментаторами области мягкого рентгеновского излучения и позволит называть ЦКП “СКИФ” источником поколения 4+.

2.1. Конфигурация комплекса и магнитная структура накопителя

Перечисленные выше соображения определили конфигурацию (рис. 3) и основные характеристики ускорительного комплекса источника СИ “СКИФ”, который состоит из линейного ускорителя – форинжектора, бустерного синхротрона с длиной орбиты 158.7 м и частотой повторения ин-

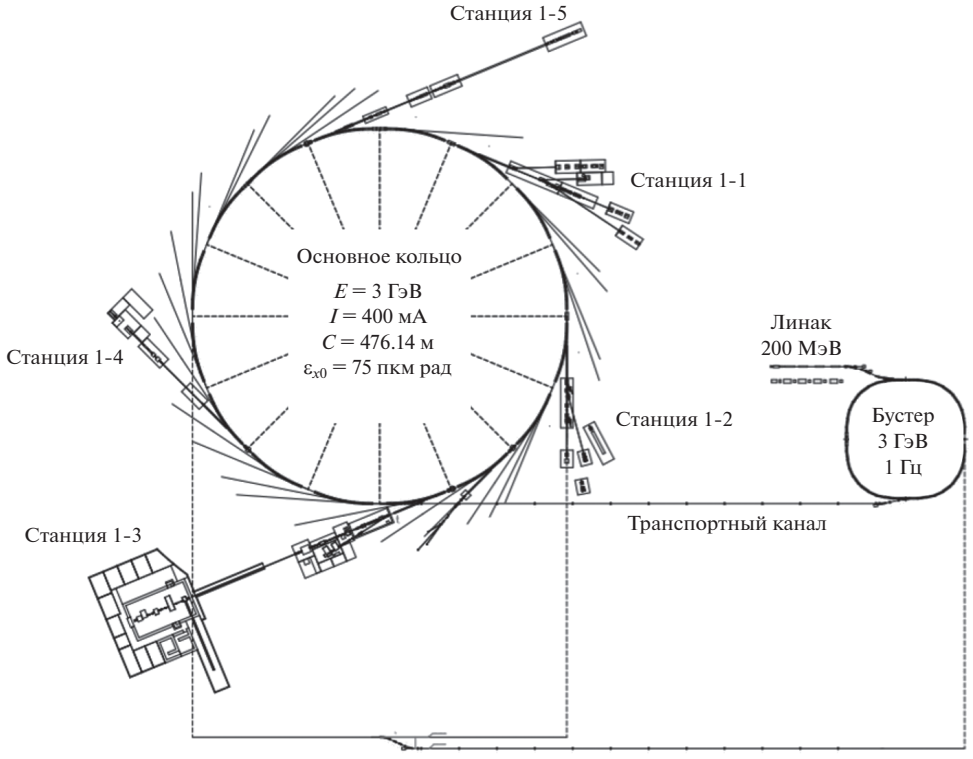


Рис. 3. Конфигурация и характеристики источника СИ четвертого поколения "СКИФ". Кроме основных установок ускорительного комплекса показан ряд экспериментальных станций.

жекционного цикла 1 Гц, основного кольца с периметром 476.14 м и 16 прямолинейными промежутками длиной 6 м. В двух промежутках планируется разместить ускоряющие резонаторы и оборудование инжекции, а оставшиеся 14 использовать для постановки "вставных устройств" – вигглеров и ондуляторов.

Магнитная структура (или структура магнитной системы) типа MBA (multi-bend achromat) всех 16 суперпериодов идентична. Элементарная ячейка базируется на одном магните со слабым поперечным отрицательным градиентом [5]. В каждом из суперпериодов один из магнитов (в центральной ячейке) создает "большое" поле 2 Тл, что позволяет выводить из него излучение с достаточно жестким спектром.

Особое внимание уделено простоте и высокой серийности магнитных элементов, что способствует скорости реализации комплекса. Не используются сложные магниты с продольным градиентом поля. Поперечный градиент в поворотных магнитах мал (около –10 Тл/м), что делает их простыми в изготовлении, измерении и настройке. Диполь с большим полем изготовлен с плоскими полюсами на постоянных магнитах и со слабой корректирующей токовой обмоткой. Магниты с обратной кривизной орбиты (reverse bend), способствующие минимизации эмиттанса, представляют собой смещенные поперечно короткие квадрупольные линзы, не требующие сложных технологических подходов для оптимизации и изготовления. Число типов магнитных элементов сведено к минимуму. Так, для получения динамической апертуры и энергетического акцептанса, достаточных для требуемого времени жизни пучка и простой, эффективной инжекции, используют всего два семейства секступольных линз.

Магнитная структура "СКИФ" состоит из 16 суперпериодов типа 7BA с пятью регулярными ячейками и двумя – на краях суперпериода – для зануления дисперсионной функции в прямолинейном промежутке. Два квадрупольных дублета настраивают в центре промежутка достаточно большую β_x (для оптимизации горизонтальной инжекции) и достаточно малую β_y (для уменьшения влияния вигглеров и ондуляторов с вертикальным полем на динамику пучка) бетатронные функции. Такая наиболее простая конфигурация прямолинейного промежутка считается базовой (рис. 4). В табл. 1 приведены основные параметры всего накопительного кольца.

Магнитная структура, показанная на рис. 4, проста, удовлетворяет основным требованиям, предъявленным выше, обладает высокой степенью симметрии и, следовательно, минимальным

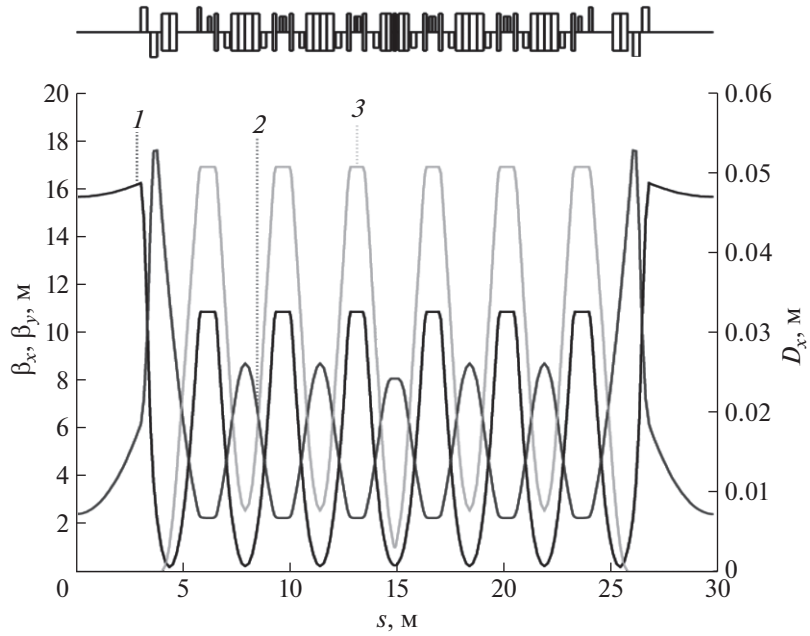


Рис. 4. Структура (вверху) и оптические функции суперпериода “СКИФ”: β_x (*1*), β_y (*2*), D_x (*3*).

числом структурных бетатронных резонансов. Оптические функции в прямолинейном промежутке (нулевая дисперсионная, большая горизонтальная β-функция и малая вертикальная) хорошо подходят для традиционной схемы инжекции в горизонтальной плоскости, размещения ускоряющих резонаторов и генераторов СИ, которые из-за малой вертикальной бетатронной функции слабо возмущают оптику кольца.

2.2. Основные аспекты динамики источника СИ “СКИФ”

Сильная фокусировка, необходимая для минимизации эмиттанса, приводит к большой хроматичности магнитной структуры, которую компенсируют мощные секступольные линзы, уменьшающие область устойчивого движения частиц по всем трем координатам (динамическую апертуру). Получение динамической апертуры, достаточной для достижения требуемого времени жизни (в условиях сильного внутрисгусткового рассеяния) и инжекции пучка, является одним из самых важных и сложных аспектов при проектировании источников СИ со сверхмалым эмиттансом. Линейный хроматизм структуры “СКИФ” компенсируют два семейства секступольных линз, размещенных только в базовых ячейках периодичности (рис. 5). Расчетные параметры секступольных линз приведены в табл. 2.

Для изучения динамической апертуры и выявления резонансных областей в окрестности рабочей точки бетатронных частот было проведено численное моделирование, результаты которого показаны на рис. 6 [6]. При моделировании начальную вертикальную координату задавали малой, но не нулевой ($y_0 = 0.1$ мм), чтобы движение было двумерным. На рис. 6а отчетливо видны секступольные резонансы первого порядка приближения $\nu_{xc} = 3$ и $3\nu_{xc} = 10$, в окрестности которых горизонтальная апертура падает до нуля, а

Таблица 1. Основные параметры базовой структуры “СКИФ”

Энергия пучка, ГэВ	3
Симметрия	16
Периметр, м	476.14
Период обращения, мкс	1.588
Горизонтальный эмиттанс, пкм·рад	73.2
Энергетический разброс	1×10^{-3}
Потери на оборот, кэВ	536
Коэффициент уплотнения орбит	7.64×10^{-5}
Натуральный хроматизм (x/y)	−149/−55
Гармоника ВЧ-резонатора	567
Частота ВЧ, МГц	357
Напряжение ВЧ, МВ	0.77
Энергетический акцептанс, %	2.6
Синхротронная частота	1.13×10^{-3}
Длина сгустка, мм	5.3
Радиационные числа (x/e)	1.94/1.06
Время затухания (x/e), мс	9.2/16.7

Примечание. Индексы x и e относятся к горизонтальному и энергетическому разбросу в сгустке.

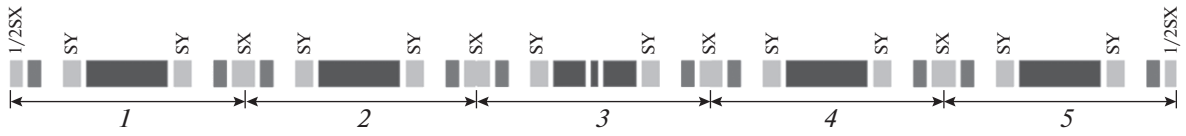


Рис. 5. Схема размещения хроматических секступольных линз.

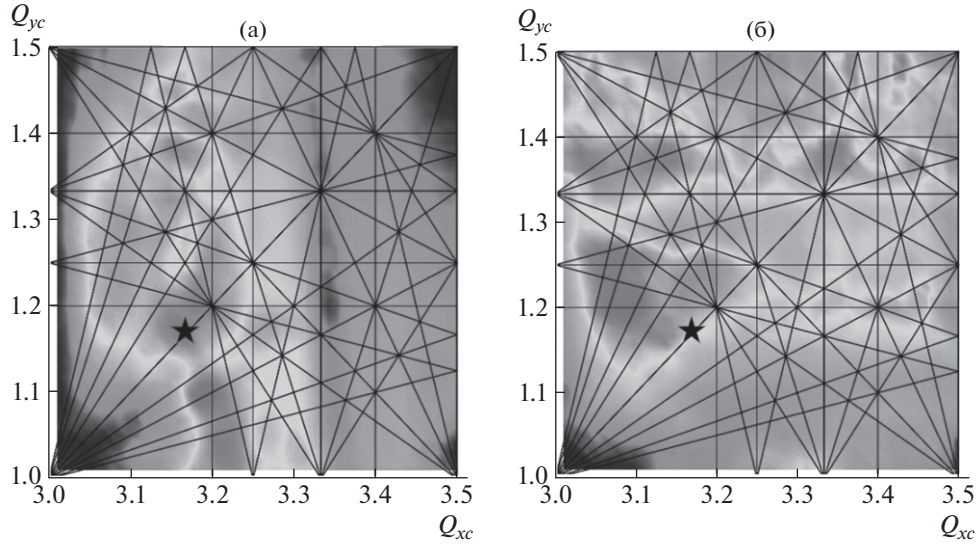


Рис. 6. Горизонтальная (а) и вертикальная (б) динамическая апертура в зависимости от бетатронных частот одного суперпериода. Звездой отмечена рабочая точка. Динамическая апертура вычисляется в центре прямолинейного промежутка, где $\beta_x = 15.6$ м, $\beta_y = 2.4$ м.

также резонансы более высоких порядков, уменьшающие апертуру. Поскольку для источника СИ четвертого поколения вертикальный эмиттанс ограничен дифракционными эффектами на уровне $\varepsilon_y \sim 10$ пкм·рад (для длины волны излучения $\lambda \sim 1$ Å) и нет смысла добиваться очень малых значений коэффициента бетатронной связи ($\varkappa \approx 5$–10% представляется достаточным), выбор рабочей точки вблизи разностного резонанса $\nu_{xc} - \nu_{yc} = 2$ выглядит допустимым и даже может быть полезным для получения круглых пучков.

Интересно проследить, как меняется горизонтальный эмиттанс в процессе сканирования, соответствующие результаты приведены на рис. 7. Хорошо виден характерный минимум в районе $\nu_{xc} \approx 3.3$, при уменьшении или увеличении горизонтальной фокусировки эмиттанс растет. Как и предсказывает теория, от вертикальной бетатронной частоты эмиттанс не зависит.

Таблица 2. Основные параметры хроматических секступолей “СКИФ”

	l, м	B''_{nom}, Тл/м^2	$(K_2 l)_{\text{nom}}$, м$^{-2}$	B''_{max}, Тл/м^2	$(K_2 l)_{\text{max}}$, м$^{-2}$
SY	0.25	−2379	−59.48	−2800	−70
SX	0.30	2313	69.39	2800	84
1/2SX	0.15	2313	34.70	2800	42

Примечание. K_2 – величина квадрупольной компоненты в разложении магнитных полей.

Другим важным аспектом динамики пучка для накопителей с малым эмиттансом является эффект внутрисгусткового рассеяния (intra-beam scattering – IBS) электронов друг на друге, которое, как правило, определяет и время жизни, и фазовый объем пучка для источников СИ четвертого поколения. Противодействовать этому эффекту можно, оптимизируя магнитную структуру – используя вигглеры (увеличивая силу трения излучения), уменьшающие времена затухания бетатронных и синхротронных колебаний, или удлиняя сгусток путем постановки резонатора третьей гармоники, который деформирует потенциал синхротронного движения.

В табл. 3 приведены параметры пучка “СКИФ” с учетом внутрисгусткового рассеяния. Показаны результаты расчетов для бетатронной связи 10 и 100%. Использован либо один ускоряющий резонатор основной гармоники, настроенный, чтобы обеспечить энергетический акцеп-

танс $(\Delta E/E)_{max} = \pm 3\%$ (случай обозначен как RF1), либо пучок, удлиняющийся примерно в 3 раза за счет дополнительной ВЧ-системы (RF1+3). Время жизни пучка "по Тушеку" τ_{TIBS} учитывает увеличение объема сгустка из-за многократного внутрисгусткового рассеяния.

В худшем случае при 10%-ной связи и без удлинения сгустка для тока 400 мА "тушековское" время жизни слегка больше 3 ч. Трехкратное удлинение более чем вдвое увеличивает время жизни. Внутрисгустковое рассеяние существенно увеличивает эмиттанс пучка. Так, при 10%-ной связи и естественной длине сгустка около 5 мм горизонтальный эмиттанс становится больше 110 пкм·рад. Удлинение электронного сгустка в 3 раза резонатором третьей гармоники и введение большой бетатронной связи существенно уменьшают эмиттанс пучка и увеличивают время жизни при номинальном токе 400 мА. Дополнительно уменьшить эмиттанс и увеличить время жизни можно с помощью постановки сверхпроводящих вигглеров, которые вносят сильное радиационное затухание.

Магнитные элементы на кольце неизбежно смещены относительно проектного положения. Точность позиционирования элементов определяется их конструкцией, погрешностями изготовления, техническими возможностями системы позиционирования. Моделирование движения частиц в накопителе "СКИФ" с учетом неточностей позиционирования, а также изучение и использование опыта современных источников СИ приводят к требованиям к допуску позиционирования магнитных элементов, представленным в табл. 4. Предполагается стандартная на сегодня схема размещения нескольких магнитных элементов на длинных (4–5 м) прецизионных подставках ("гирдерах" – girder), поскольку коррелированное перемещение магнитов существенно уменьшает искажение замкнутой орбиты. Значения в таблице представляют собой среднеквадратичные отклонения от проектного положения. В последнем столбце таблицы приведены допуски на поворот магнитов вокруг продольной оси (оси пучка).

Для измерения замкнутой орбиты в "СКИФ" имеются 224 датчика положения пучка. Для коррекции замкнутой орбиты предусмотрены дипольные корректоры, большая часть которых реализована в виде обмоток питания на полюсах секступольных линз. Каждая из 256 секступольных линз несет кроме основных секступольных катушек дополнительные, относительно слабые катушки коррекции, включая дипольную компоненту (вертикальную и горизонтальную), создающую поле до 100 Гс и градиентную компоненту (нормальную и скью (skew)) с максимальным значением градиента до 100 Гс/см.

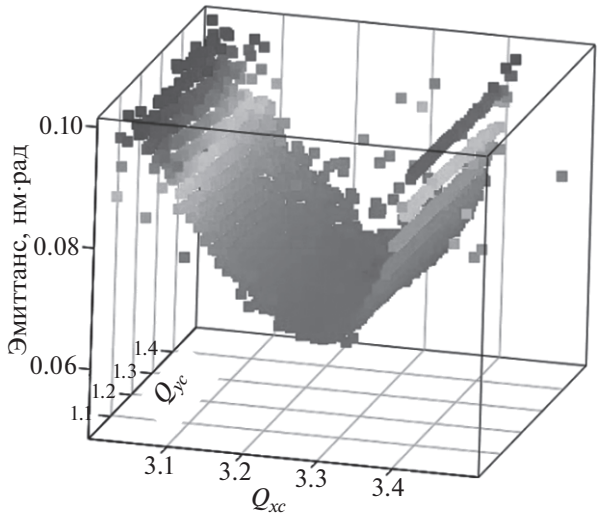


Рис. 7. Изменение горизонтального эмиттанса накопителя в зависимости от выбранной рабочей точки частот.

Дополнительно в каждом суперпериоде размещены два отдельно стоящих дипольных корректирующих магнита. Каждый из них при магнитной длине 5 см создает дипольную компоненту с индукцией до 400 Гс, а также скью-квадруполь с градиентом до 200 Гс/см. Таким образом, в накопительном кольце есть 320 дипольных корректоров по горизонтали и столько же по вертикали, 288 скью-квадрупольных и 256 квадрупольных корректоров.

Для моделирования искажения и коррекции замкнутой орбиты в накопителе ошибки позиционирования магнитных элементов (табл. 4) задавали в структуре кольца случайным образом согласно распределению Гаусса (24 выборки), ограниченному на уровне $\pm 2\sigma$ во избежание нереально больших искажений. Искаженную за-

Таблица 3. Параметры пучка при разных параметрах поперечной связи (500 сгустков, 400 мА, потери/оборот 0.531 МэВ, $V_{RF} = 0.845$ МВ, $(\Delta E/E)_{max} = \pm 3\%$)

	10%		100%	
	RF1	RF1+3	RF1	RF1+3
ε_{x0}, пкм·рад	72.7			
$\varepsilon_{x\text{coupled}}$, пкм·рад	66		36	
$\varepsilon_{x\text{IBS}}$, пкм·рад	113	90	59	47
$\varepsilon_{y\text{IBS}}$, пкм·рад	11	9	59	47
$\sigma_E/E \times 10^4$ (0/IBS)	10.3/12.4	10.3/11.4	10.3/11.4	10.3/10.9
σ_l, мм (0/IBS)	5.3/5.9	15.8/16.2	5.3/5.4	15.8/15.4
τ_{TIBS}, ч	3.2	7.9	6.2	17

Таблица 4. Требования к позиционированию магнитных элементов основного кольца

	σ_x, мкм	σ_y, мкм	σ_s, мкм	σ_ψ, мкрад
Гирдеры	80	80	150	200
Элементы на гирдере	30	30	150	200

Таблица 5. Поля в корректорах для исправления искажения орбиты

Коррекция в секступолях		Отдельные корректоры
$G_{\text{skew-max}}$, Гс/см	60	–
$G_{\text{norm-max}}$, Гс/см	30	–
$B_{\text{hor-max}}$, Гс	60	300
$B_{\text{ver-max}}$, Гс	55	280

Примечание. Здесь и далее G – градиент магнитного поля в квадрупольной линзе.

Таблица 6. Параметры кольца “СКИФ” после коррекции замкнутой орбиты

Остаточное среднеквадратичное искажение орбиты по x, мкм	80
Остаточное среднеквадратичное искажение орбиты по y, мкм	98
Горизонтальный эмиттанс, пкм·рад	74 ± 2
Коэффициент связи бетатронных колебаний, %	0.1
Остаточные биения β-функций, %	1

Таблица 7. Параметры линейного ускорителя инжектора “СКИФ”

Энергия электронов, МэВ	200
Максимальная энергия, МэВ	210
Частота выстрелов, Гц	1
Геометрический эмиттанс при 200 МэВ, нм·рад	150
Разброс по энергии при 200 МэВ, %	≤1

мкнутую орбиту исправляли в три этапа. Вначале корректировали собственно орбиту при помощи программы MAD-X [7]. Затем исправляли отклонение оптических функций от расчетных с помощью градиентных корректирующих обмоток и, наконец, скью-квадрупольными корректирующими катушками компенсировали линейную связь бетатронных колебаний.

В табл. 5 приведены амплитудные значения полей корректоров, которые понадобились для удовлетворительной коррекции орбиты, оптики и бетатронной связи. Эти значения приблизительно в 2 раза меньше проектных, приведенных выше. Следовательно, система коррекции обладает необходимым запасом сил корректоров.

В табл. 6 даны основные параметры оптической системы накопителя “СКИФ” после искажения замкнутой орбиты, вызванного погрешностями позиционирования магнитных элементов, и последующей коррекции орбиты и параметров оптики. Остаточная среднеквадратичная погрешность орбиты по показаниям датчиков положения пучка не превышает 100 мкм, что приводит к “биению” бетатронных функций на уровне 1% и значению горизонтального эмиттанса 74 ± 2 пкм·рад. Связь бетатронных колебаний удается скомпенсировать до значения 10^{-3} (отношение вертикального эмиттанса к горизонтальному).

2.3. Основные технические системы источника СИ “СКИФ”

2.3.1. Система инжекции. Инжекция электронов в источник СИ “СКИФ” (top-up injection) осуществляется при энергии 3 ГэВ с частотой, задаваемой током и временем жизни пучка в основном накопителе. Инжекционный комплекс состоит из линейного ускорителя с максимальной энергией 200 МэВ, бустерного синхротрона и каналов транспортировки пучков. В основном режиме работы источник СИ “СКИФ” заполняется приблизительно 500 сгустками электронов (частота ВЧ-резонаторов бустера и накопителя 357 МГц) с полным током 400 мА. Максимальная частота повторения циклов инжекции – 1 Гц. Для экспериментов с временным разрешением могут быть использованы специальные режимы с одним или несколькими сгустками, распределенными требуемым образом вдоль орбиты. В основном режиме накопителя инжекция осуществляется цугами по 55 сгустков с зарядом ~0.3 нКл в каждом, в специальных режимах управление модулятором пушки позволяет получить в цуге один или несколько (в пределах огибающей 310 нс) сгустков. В последнем случае для уменьшения времени заполнения кольца интенсивность сгустка может быть увеличена до ~1 нКл. Параметры линейного ускорителя приведены в табл. 7.

Линак состоит из трех основных частей (рис. 8): источника электронов, систем группировки и предускорения и регулярных ускоряющих структур. В каждой части имеются элементы, обеспечивающие фокусировку и диагностику пучка, необходимые вакуумные условия.

К основным компонентам линейного ускорителя относятся следующие подсистемы: источник электронов – СВЧ-пушка с рабочей частотой 178.5 МГц; резонатор группировки пучка с частотой 535.5 МГц (третья гармоника рабочей частоты СВЧ-пушки); предускоритель-группирова-

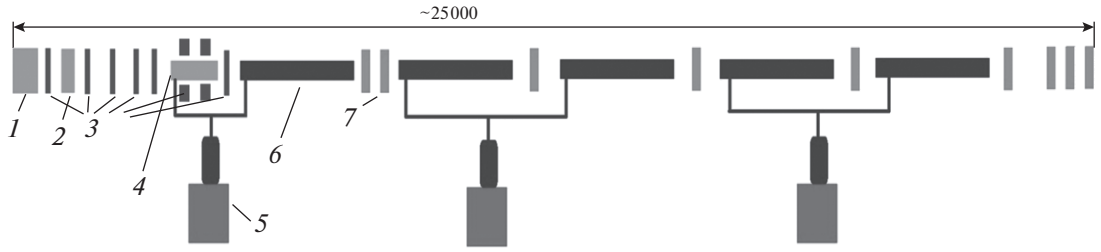


Рис. 8. Схема линейного ускорителя инжектора “СКИФ”: *1* – ВЧ-пушка 178 МГц; *2* – группирователь третьей гармоники 534 МГц; *3* – соленоиды; *4* – предускоритель-группирователь; *5* – клистрон 2856 МГц, 50 МВт; *6* – регулярная ускоряющая секция 2856 МГц; *7* – квадрупольный дублет.

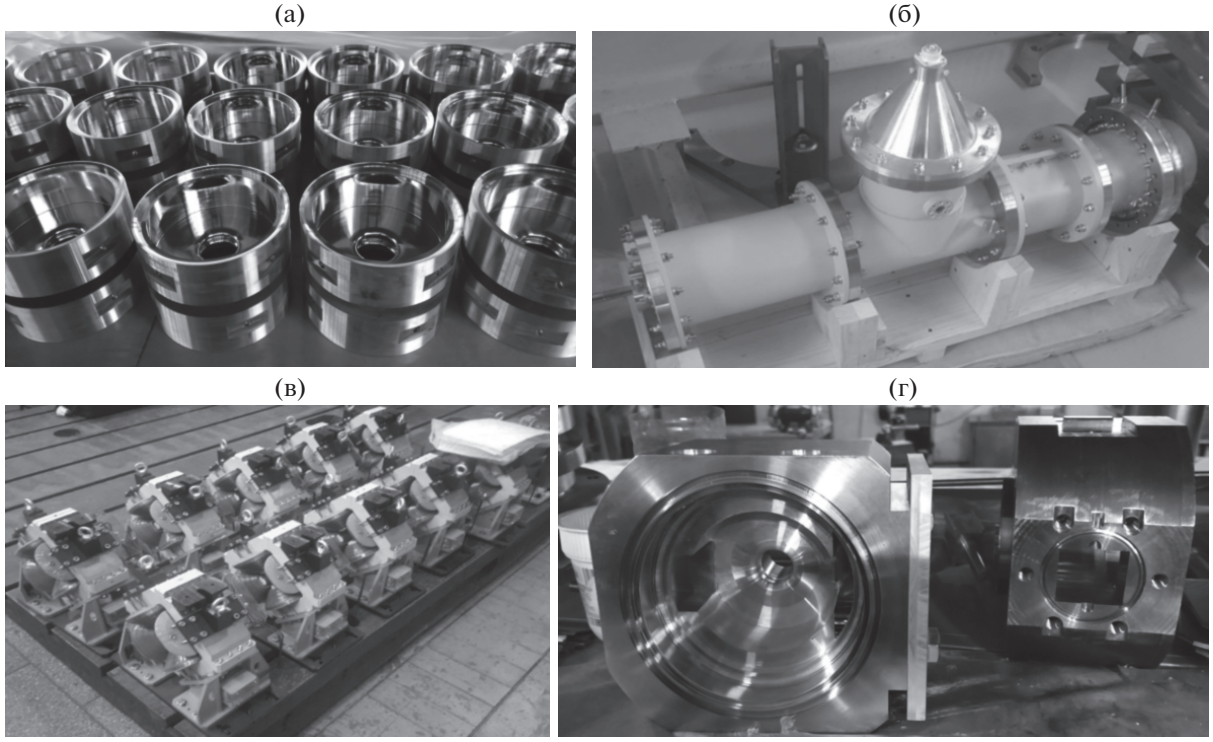


Рис. 9. Изготовленные в ИЯФ СО РАН компоненты линака “СКИФ” (март 2022 г.): а – секции основной ускоряющей структуры, б – катодный узел электронной СВЧ-пушки, в – фокусирующие квадрупольные линзы линака и канала перепуска, г – анодный фланец СВЧ-пушки.

тель, представляющий собой структуру на бегущей волне ($2\pi/3$) с частотой 2856 МГц; основная ускоряющая структура (пять секций длиной 3 м каждая) на бегущей волне ($2\pi/3$) с частотой 2856 МГц; источники СВЧ-питания – пушки с выходной мощностью примерно 1 МВт, резонатор группировки пучка мощностью 10 кВт – три клистрона, питающие предускоритель-группирователь и пять секций основной ускоряющей структуры. Параметры клистрона: частота – 2856 МГц, номинальная мощность – 50 МВт. На рис. 9 показано изготовление элементов линейного ускорителя.

Бустерный синхротрон предназначен для ускорения пучка электронов из линейного ускорителя с энергией 200 МэВ до проектной энергии основного кольца 3 ГэВ. Основные фазы работы бустера: инжекция цуга электронных сгустков, выпущенных из линейного ускорителя, их ускорение до рабочей энергии накопителя с минимальными потерями и выпуск пучка в транспортный канал с параметрами, позволяющими осуществлять инжекцию в основное кольцо с эффективностью, близкой к единице. Горизонтальный эмиттанс и энергетический разброс инжектируемого из линака пучка $\varepsilon_{xi} = 4\sigma_{xi}\sigma'_{xi} = 1.5\times10^{-7}$ м рад и $(\sigma_E/E)_i < 10^{-2}$ соответственно. Магнитная структура синхротрона включает в себя четыре квадранта-суперпериода, каждый из

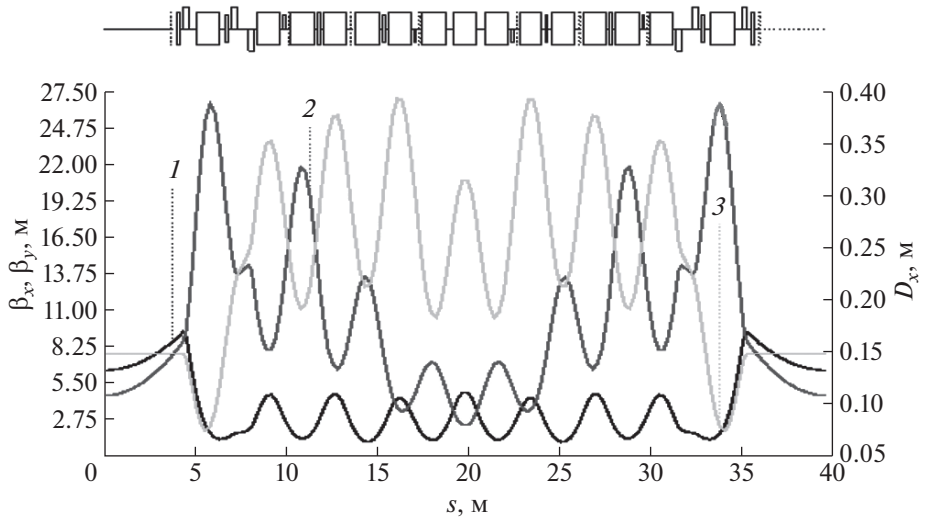


Рис. 10. Структура (вверху) и оптические функции квадранта синхротрона: β_x (*1*), β_y (*2*), D_x (*3*).

которых состоит из пяти стандартных и двух модифицированных ячеек для подавления дисперсии. Квадрант содержит следующие магнитные элементы: восемь дефокусирующих дипольных магнитов с углом поворота 8.39°; семь фокусирующих магнитов с углом поворота 3.27° (оба диполя представляют собой H-образные изогнутые магниты с параллельными полюсами, для компенсации хроматизма в них введена секступольная компонента поля); шесть квадрупольных магнитов для настройки бетатронных частот; четыре секступольных магнита для удобства компенсации хроматизма. Графики структурных функций одного суперпериода представлены на рис. 10. Основные параметры приведены в табл. 8.

Таблица 8. Основные параметры бустерного синхротрона при энергии инжекции и выпуска пучка

Энергия, ГэВ	0.2	3
Длина окружности, м	158.71	
Максимальный ток, мА		
Период обращения, нс	529	
Натуральный хроматизм ξ_x/ξ_y	−9.5/−13.5	
Коэффициент уплотнения орбит α	8.81×10^3	
Частота ВЧ-системы, МГц	357	
Номер ВЧ-гармоники	189	
Амплитуда ускоряющего напряжения, МВ	0.2	1.2
Синхротронная частота, кГц	30.75	20.9
Энергетический ВЧ-акцептанс ε_{RF}, %	1.96	0.54
Горизонтальный эмиттанс ε_x, нм·рад	0.166	37.4
Разброс энергии $\sigma_E/E \times 10^4$	0.55	8.31
Продольный размер пучка, мм	0.76	19.8
Потери энергии за оборот U_0, кэВ	0.0135	685.8
Времена затухания τ_x/τ_s, мс	$15.6/7.8 \times 10^3$	4.62/2.32

Стандартный цикл работы бустера, соответствующий частоте 1 Гц, показан на рис. 11. Цикл включает в себя однократный впуск пучка (состоящего из одного или нескольких сгустков), ускорение, выпуск в основное кольцо, перемагничивание до энергии инжекции, которое совмещается с размагничиванием корректоров. После накопления требуемой интенсивности пучка в основном кольце бустер перестает циклировать и остается в режиме пучка из линака. На рис. 12 представлено изготовление элементов бустерного синхротрона “СКИФ”.

2.3.2. Магнитная система накопителя “СКИФ”. Характерными чертами магнитной системы источника СИ четвертого поколения являются большие градиенты квадрупольных и секступольных линз, использование магнитов с совмещенными функциями (например, наличие градиента в дипольном магните), плотная “упаковка” магнитных элементов в продольном направлении. Большие градиенты приводят к малым апертурам, а поскольку требования к качеству магнитного поля высоки, соответственно, увеличивается точность изготовления магнитов и их взаимного позиционирования. Основные характеристики магнитов “СКИФ” представлены в табл. 9.

В настоящее время в ИЯФ СО РАН начато изготовление первых магнитных элементов накопителя электронов ЦКП “СКИФ”. На рис. 13 показаны трехмерные модели магнитов.

Рис. 11. Временной цикл работы синхротрона-бустера “СКИФ”.

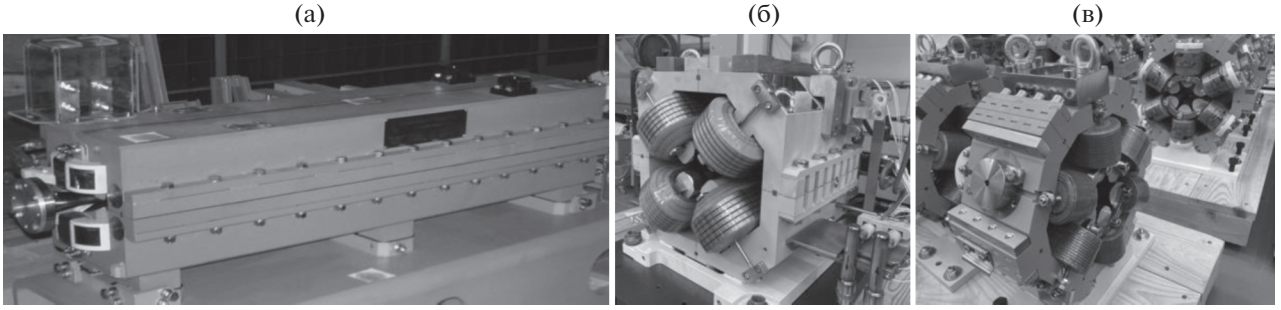


Рис. 12. Изготовленные дипольный (а), квадрупольный (б) и секступольный (в) магниты синхротрона-бустера “СКИФ”.

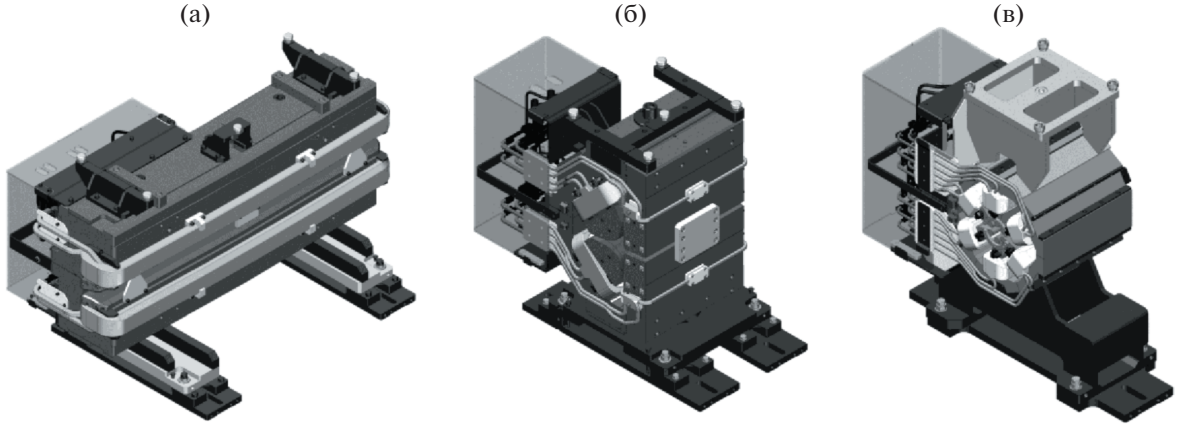


Рис. 13. Трехмерные модели основных магнитов накопителя “СКИФ”: дипольного магнита с градиентом (а), квадрупольной (б) и секступольной (в) линз.

2.3.3. Вакуумная система накопителя “СКИФ”. Расчеты показывают, что для обеспечения “вакуумного” времени жизни пучка 10 ч в накопителе “СКИФ” среднее давление остаточных газов (в эквиваленте CO) должно быть не более 2.5 нторр (3.3×10^{-7} Па).

В связи с развитием и широким распространением в последнее время малогабаритных комбинированных вакуумных насосов (ионно-геттерный + геттерный) [8] и методов нанесения нераспыляемых геттеров внутри малоапертурных камер [9–14] в накопителе “СКИФ” принята ги-

Таблица 9. Основные параметры магнитных элементов накопителя для базовой структуры

Тип/число	L, м	θ, град	ρ, м	B, Тл	G, Тл/м	S, Тл/м^2
Дипольные магниты						
BD1/64	1.3	4.12	18.07	0.553	−7.91	
BD2/32	0.47	1.245	21.62	0.526	−10.74	
BM/32	0.69	2.079	19.01	0.526		
BP/16	0.148	1.74	4.87	2.05		
Квадрупольные магниты						
QD/32	0.3				−44.56	
QF1/32	0.3				43.97	
QF2/32	0.15				48.66	
QF3/128	0.15	−0.221	−38.84	−0.257	51.52	
QF4/32	0.15	−0.3	−28.66	−0.349	49.87	
Секступольные магниты						
SF1/32	0.15					2313.09
SD/160	0.25					−2379.39
SF2/64	0.3					2313.09

бридная система вакуумной откачки: сосредоточенные комбинированные насосы в арках и распределенные насосы на основе геттерных пленок системы TiZrV в прямолинейных промежутках. Геттерные пленки будут также применяться во вставных устройствах, работающих при комнатной температуре. Во вставных устройствах со сверхпроводящими магнитными элементами вакуумная камера пучка автоматически будет играть роль эффективного распределенного криогенного насоса. Комбинированные насосы расположены в среднем на расстоянии 1 м друг от друга. Быстрота откачки насоса по CO не менее 120 л/с.

Особое внимание уделяют подбору материалов для изготовления вакуумных элементов, конструкциям откачных портов и соединительных элементов для минимизации резистивных и геометрических импедансов. Ступеньки и щели во фланцевых соединениях и сильфонных узлах вакуумных камер вследствие их большого количества могут быть значительными источниками импедансов. В накопителе “СКИФ” применяются алюминиевые вакуумные камеры. Фланцы камер также сделаны из алюминиевого сплава.

На рис. 14 показана вакуумная камера со стандартным откачным портом. Фланцы DN63 откачного порта имеют стандарт ConFlat, но выполнены из алюминиевого сплава. Фланцы имеют стандартный нержавеющий крепеж и титановое кольцо, компенсирующее тепловое удлинение камеры. Данная вакуумная камера проходит через квадрупольный и секступольный магниты. К откачным портам подключается вакуумное оборудование: насосы, вакуумметры или анализаторы остаточных газов.

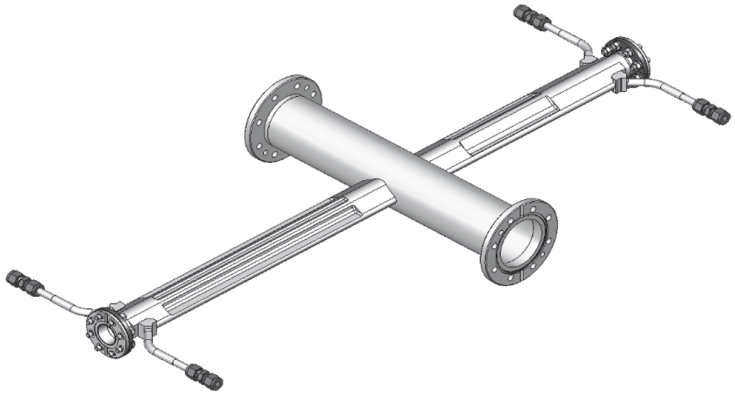


Рис. 14. Вакуумная камера со стандартным откачным портом.

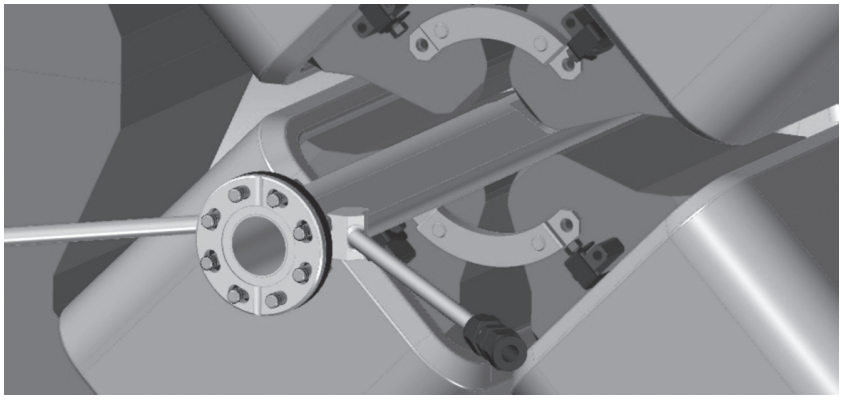


Рис. 15. Трехмерная модель вакуумной камеры в квадрупольном магните.

Камера выполнена из алюминиевого профиля, полученного методом экструзии. Она имеет два канала в горизонтальной плоскости. Один канал используется для водяного охлаждения, второй может быть применен для прокладки нагревающего кабеля. Трехмерная модель вакуумной камеры, вставленной в квадрупольную линзу, с фланцевым соединением и патрубками водяного охлаждения показана на рис. 15.

2.3.4. Ускоряющие резонаторы ЦКП “СКИФ”. Ускоряющие системы бустера и накопителя “СКИФ” работают на одной и той же частоте 357 МГц. Основные компоненты системы (высокочастотные ускоряющие резонаторы с подавлением высших мод и твердотельные ВЧ-генераторы) унифицированы для обеих установок. Количество резонаторов в бустере – 3 шт., в накопителе – 5 шт.

При энергии выпуска резонаторы бустера должны обеспечить ускоряющее напряжение 1.2 МВ. Мощность радиационных потерь при энергии выпуска и среднем токе пучка 30 мА составляет 20.6 кВт. Резонаторы накопителя должны обеспечить ускоряющее напряжение 1.8 МВ. Мощность радиационных потерь при энергии выпуска и среднем токе пучка 400 мА составляет 430 кВт.

Конструкция ВЧ-резонатора имеет форму цилиндра, ось которого совпадает с направлением движения частиц. К барельной части резонатора крепятся три волноводных перехода, запредельных для основной гармоники, на конце которых располагаются СВЧ-поглотители для демпфирования высших мод, возбуждаемых в резонаторах пролетающими сгустками электронов, а также канал ввода ВЧ-мощности, узел перестройки частоты и вакуумный насос. Внутренняя геометрия резонатора оптимизирована для того, чтобы, с одной стороны, максимально обеднить спектр высших мод, а с другой – обеспечить приемлемые параметры на основной моде. В получившейся геометрии спектр высших мод существенно прорежен, но шунтовое сопротивление основной моды осталось достаточно высоким – 2.55 МОм. Максимальная плотность мощности при напряжении 400 кВ составит 15.7 Вт/см^2. Трехмерная модель резонатора представлена на рис. 16. Параметры резонатора перечислены в табл. 10.

3. УСТРОЙСТВА ГЕНЕРАЦИИ ИЗЛУЧЕНИЙ И ФРОНТЕНДЫ ДЛЯ ВЫВОДА СИ

3.1. Устройства генерации излучений

Для размещения многополюсных устройств генерации излучений (ондуляторов или вигглеров) в ЦКП “СКИФ” имеются 14 промежутков длиной 6 м каждый. Кроме того, в каждом суперпериоде есть возможность вывода излучения из двух поворотных магнитов с полями около 0.5 и 2 Тл. Основные характеристики точек излучения представлены в табл. 11.

Экспериментальные станции первой очереди в качестве устройств генерации используют вигглеры и ондуляторы. Тип и параметры каждого устройства генерации определяются экспериментальными требованиями. Для станций 1-3 и 1-5 будут изготовлены сверхпроводящие вигглеры, параметры которых (для тока пучка 400 мА) указаны в табл. 12. Подобные вигглеры производства ИЯФ СО РАН применяют во многих центрах СИ [15, 16], их общий вид (в криостате) представлен на рис. 17.

Три станции первой очереди будут использовать излучение из сверхпроводящих ондуляторов двух типов, параметры которых представлены в табл. 13. Ондулятор с параметрами, близкими к требуемым, был разработан и создан в ИЯФ СО РАН для источника СИ Diamond (Великобритания). Набор полюсов такого ондулятора показан на рис. 18.

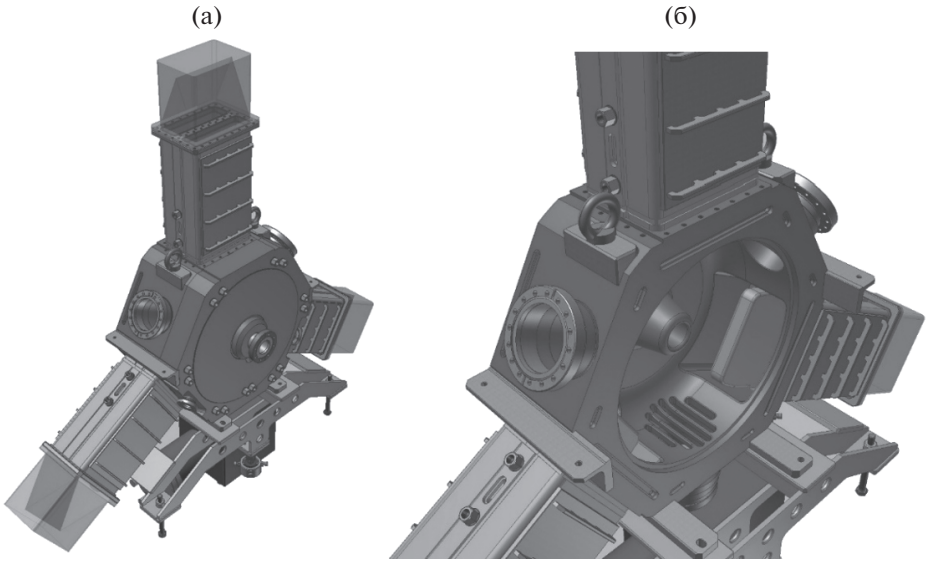


Рис. 16. 3D-модель резонатора: а – резонатор в сборе, б – без торцевой стенки.

Для станции 1-6 предполагается разработать специализированный электромагнитный ондулятор с эллиптической поляризацией, позволяющий получать фотоны с линейной, эллиптической и в ряде случаев циркулярной поляризацией в спектральных диапазонах мягкого рентгена и вакуумного ультрафиолета. Основные параметры ондулятора представлены в табл. 14. Графики яркости СИ в зависимости от энергии фотонов для разных устройств генерации представлены на рис. 19. Расчеты спектров проводили с помощью пакета SPECTRA [17].

3.2. Фронтенды и каналы вывода СИ для станций первой очереди

Фронтенды (переходная часть от вакуумной камеры накопителя к каналу вывода СИ) располагаются в ускорительном зале до стены биозащиты. Они содержат устройства коллимации, вакуумной защиты, приема и контроля положения прямого пучка СИ, транспортируемого из накопителя к экспериментальной станции. Система радиационных затворов и коллиматоров обеспечивает радиационные условия в экспериментальном помещении на безопасном уровне. От накопителя и канала вывода СИ фронтенд отсекается цельнометаллическими шиберами.

В настоящее время для станций первой очереди ведется разработка фронтендов, конструктивные решения которых определяются типом и характеристиками устройства генерации излучений. Шесть проектируемых фронтендов можно разделить на три группы: для сверхпроводящих вигглеров (станции 1-3 и 1-5); для сверхпрово-

Таблица 10. Параметры резонатора на основной моде

	Бустер*	Накопитель
Рабочая частота f_0, МГц	357	
Диапазон перестройки частоты Δf, МГц	1	
Собственная добротность $0.7Q_{0\ 3D\ model}$	17000	
Характеристическое пролетное сопротивление R/Q, Ом	150	
Шунтовое пролетное сопротивление R, МОм	2.55	
Амплитуда ускоряющего напряжения V_m, кВ	400	360
Мощность потерь в стенках P, кВт	31.4	26
Максимальная плотность мощности потерь p_{max}, Вт/см^2	15.7	13
Мощность, передаваемая пучку для компенсации радиационных потерь P_b, кВт	6.9	86

* В случае резонаторов бустера параметры приведены для энергии выпуска.

Таблица 11. Основные характеристики точек излучения

	Промежуток	Магнит 2 Тл	Магнит 0.5 Тл
Значения β-функций β_x/β_y, м	15.6/2.4	0.3/7.8	0.2/8.9
Дисперсионная функция D_x, мм	0	3	8
Индукция магнитного поля B, Тл		1.95–2.05	0.554
Критическая энергия фотонов, кэВ		11.9	3.3
Плотность мощности в плоскости орбиты, Вт/мрад		91.2	25.25
Размер источника горизонтальный/вертикальный, мкм	108.2/13.3	14.1/24.1	15.6/25.9

Таблица 12. Параметры вигглеров для станций первой очереди

	1-3	1-5
Период, мм	27	48
Максимальное вертикальное поле, Тл	2.7	4.5
Параметр K	6.8	20.2
Магнитная длина, м	1.84	0.86
Количество периодов	68	18
Апертура фиксированной маски (ширина × высота), мрад	1.8 × 0.11	2 × 0.2
Критическая энергия фотонов, кэВ	16.16	26.93
Полная мощность излучения, кВт	30.7	39.8
Плотность мощности на оси, кВт/мрад^2	64.25	28.39
Угловая расходимость горизонтальная, мрад	3.6	4.9

Примечание. Здесь и далее параметр K – одна из характеристик многополюсных устройств генерации.

дящих ондуляторов с разделительными окнами (1-1 и 1-2); для мягкого ондуляторного излучения без разделительных окон (1-4 и 1-6).

Основными компонентами фронтендов являются: предохранительный магнит, который предотвращает возможность пролета первичных

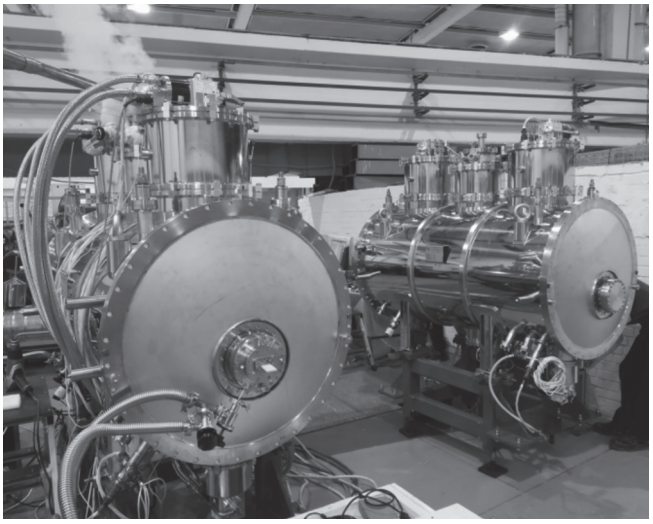


Рис. 17. Общий вид сверхпроводящих вигглеров, аналогичных разрабатываемым в проекте.

Таблица 13. Основные параметры сверхпроводящих ондуляторов для станций первой очереди

Станция	1-1 и 1-2	1-4
Период, мм	15.6	18
Максимальное вертикальное поле, Тл	1.25	1.5
Параметр K	1.8	2.5
Магнитная длина, м	1.99	1.96
Количество регулярных периодов	126	109
Межполюсный зазор, мм	7	7
Апертура фиксированной маски, мрад	0.2 × 0.2	0.2 × 0.2
Полная мощность излучения, кВт	6.99	10.05
Фундаментальная гармоника, кэВ	2.06	1.13
Плотность мощности на оси, кВт/мрад^2	53.96	56.59

Таблица 14. Основные параметры эллиптического ондулятора

Период, мм	212
Максимальное вертикальное поле, Тл	0.49
Максимальное горизонтальное поле, Тл	0.05
Параметр K	0.9–9
Магнитная длина, м	4.92
Количество регулярных периодов	20
Межполюсный зазор, мм	19
Апертура фиксированной маски, мрад	0.42 × 0.42

электронов или электронно-позитронных ливней, образующихся в вакуумной камере накопителя или каналах вывода; пластинчатый датчик, измеряющий положение центра тяжести проходящего пучка (основан на измерении фототока с пластин, поглощающих крайние боковые лучи); фиксированная маска для первичной коллимации выходящих пучков (выходные апертуры масок рассчитывают для каждого фронтенда индивидуально); регулируемая маска для точной настройки размеров пропускаемого пучка по вертикали и горизонтали; радиационный затвор, оперативно перекрывающий выходной канал, предотвращая выход излучения и ослабляя ливни до безопасного для персонала уровня; радиаци-

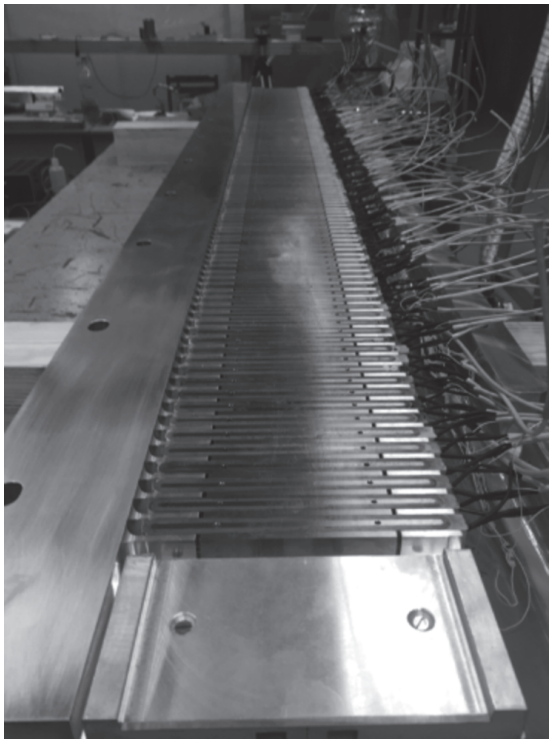


Рис. 18. Нижняя половина сверхпроводящего ондулятора до постановки в криостат.

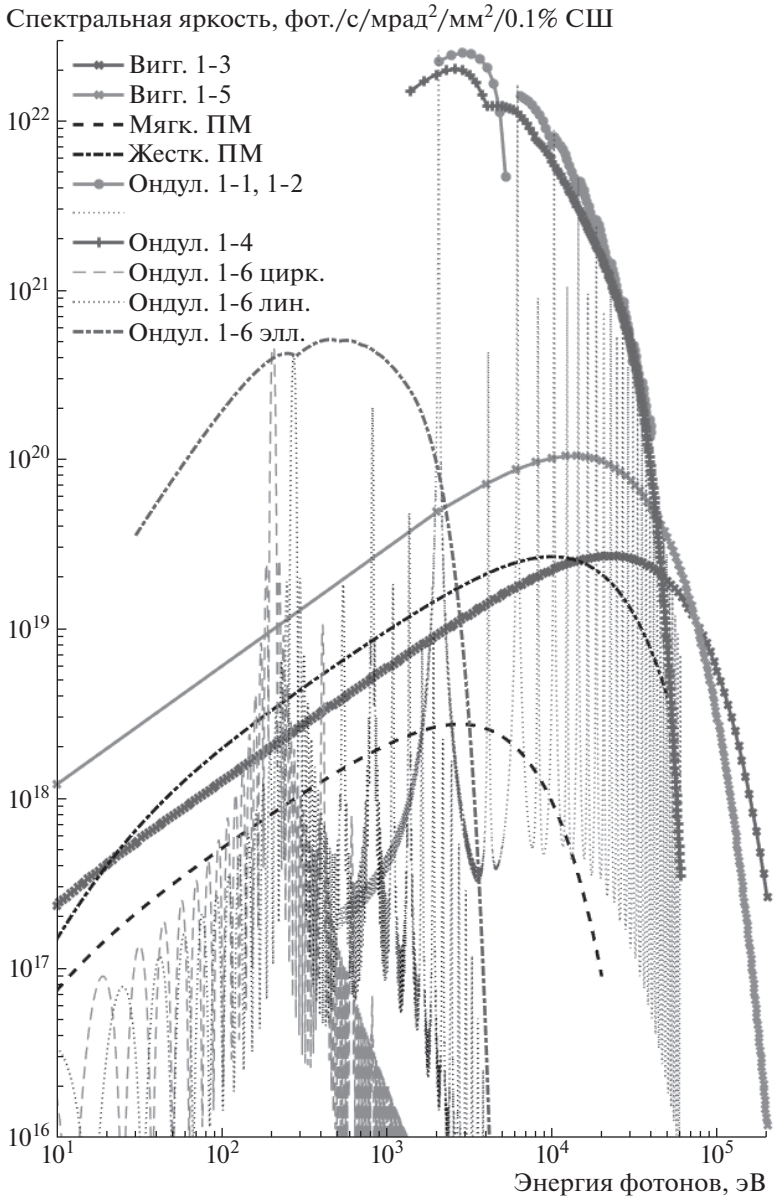


Рис. 19. Спектры основных устройств станций первой очереди, генерирующих излучение, и поворотных магнитов "СКИФ". Яркость представлена для относительной спектральной ширины (СШ) интервала $\Delta\varepsilon/\varepsilon = 0.1\%$.

онный коллиматор для поглощения боковых лучей тормозных ливней.

Вакуумная система фронтендов включает в себя набор вакуумных клапанов и откачных портов с системами измерения давления. На безоконные и вигглерные фронтенды устанавливают системы быстрого перекрывания каналов для обеспечения вакуумной безопасности накопительного кольца в случае аварийного нарушения вакуума. Во фронтендах с алмазными охлаждаемыми окнами происходит разделение вакуумных объемов.

В состав каждого фронтенда включается система контроля и управления. Помимо оперативного управления элементами фронтенда на нее возлагается контроль текущего состояния элементов, вакуума и температуры поглощающих элементов, а также выполнение сценариев остановки работ в случае возникновения аварийных ситуаций. Общий вид элементов фронтенда представлен на рис. 20.

4. ИНЖЕНЕРНО-СТРОИТЕЛЬНАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ЦКП "СКИФ"

Как упоминалось выше, местом размещения ЦКП "СКИФ" выбран наукоград Кольцово, рас-

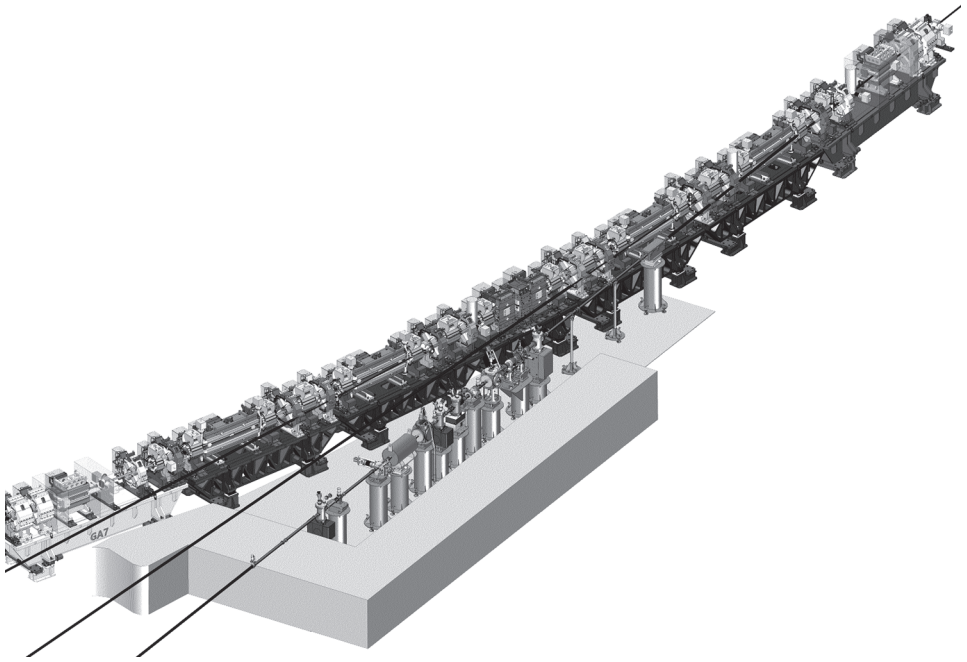


Рис. 20. Общий вид элементов фронтенда 1-1 в тоннеле основного кольца.

положенный в 10 км от Новосибирского Академгородка и в 20 км от центра Новосибирска. При выборе локации учитывали такие факторы, как геологическое строение участка, отсутствие крупных промышленных предприятий, которые могут стать источником микросейсмического фона, наличие требуемых свободных энергоресурсов, близость научных центров и другие факторы. В Кольцово находятся Биотехнопарк Новосибирской области, ГНЦ вирусологии и биотехнологии "Вектор", другие организации, работающие в сфере микробиологии, биохимии и медицины, заинтересованные в проведении исследований в ЦКП "СКИФ".

Таблица 15. Основные строительные характеристики ЦКП "СКИФ"

Наименование показателя	Единица измерения
Общая площадь участка, м^2	298222.0
Площадь застройки, м^2	66294.9
Площадь покрытий (проезды, площадки, тротуары), м^2	88245.6
Площадь озеленения, м^2	134248
Плотность застройки, %	22.2

В состав инженерного комплекса ЦКП "СКИФ" входят 34 здания и сооружения. Схема их размещения на площадке приведена на рис. 21. Общий архитектурный вид ЦКП "СКИФ" показан на рис. 22. Основные строительные характеристики комплекса представлены в табл. 15, а оценки объема потребляемых ресурсов – в табл. 16.

При работе современных источников СИ жесткие требования предъявляют к стабильности параметров самых разных систем, включая термостабилизацию деионизированной воды для охлаждения магнитных элементов и приемников излучения, воздуха в помещениях, где располо-

Таблица 16. Основные энергетические потребности ЦКП "СКИФ"

Ресурс	Показатель
Электроснабжение, МВт	12.447
Теплоснабжение, Гкал/ч	6.839
Водоснабжение с учетом приготовления горячей воды, м^3/ч	44.86
Водоотведение (бытовая канализация), м^3/ч	40.06
Водоотведение (ливневая канализация), м^3/ч	504
Интернет, Гбит/с	3

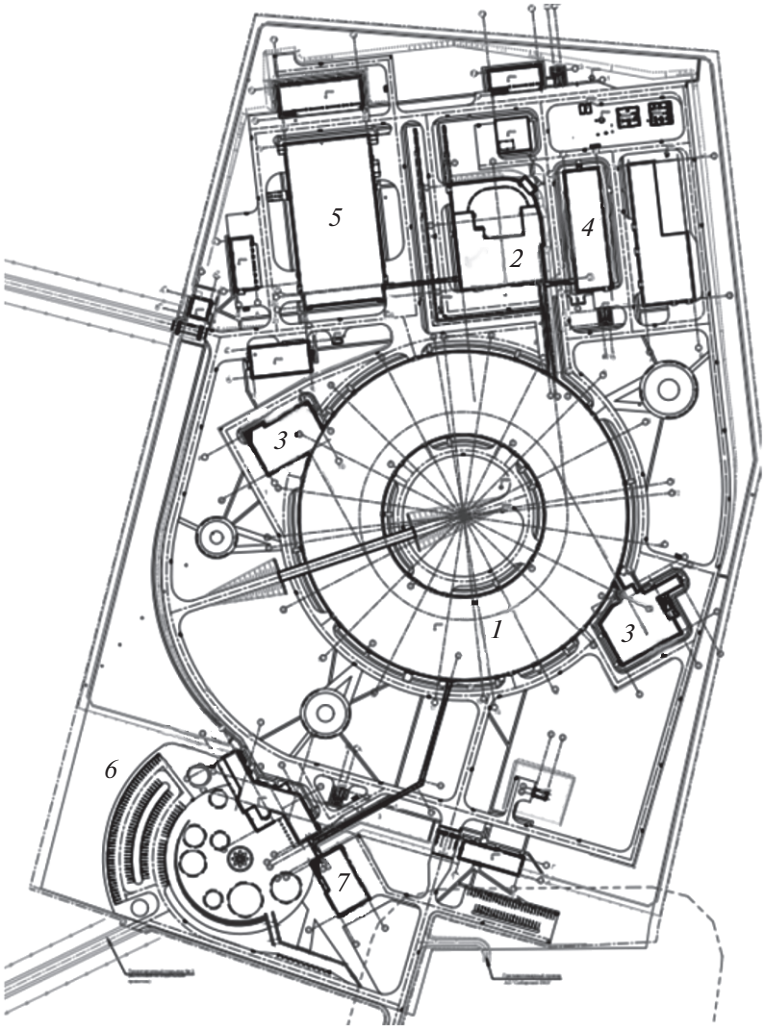


Рис. 21. Схема размещения зданий и сооружений ЦКП “СКИФ”: *1* – накопитель, *2* – инжектор, *3* – вынесенные экспериментальные станции, *4* – лабораторный корпус, *5* – корпус стендов и испытаний, *6* – административный корпус, *7* – столовая.

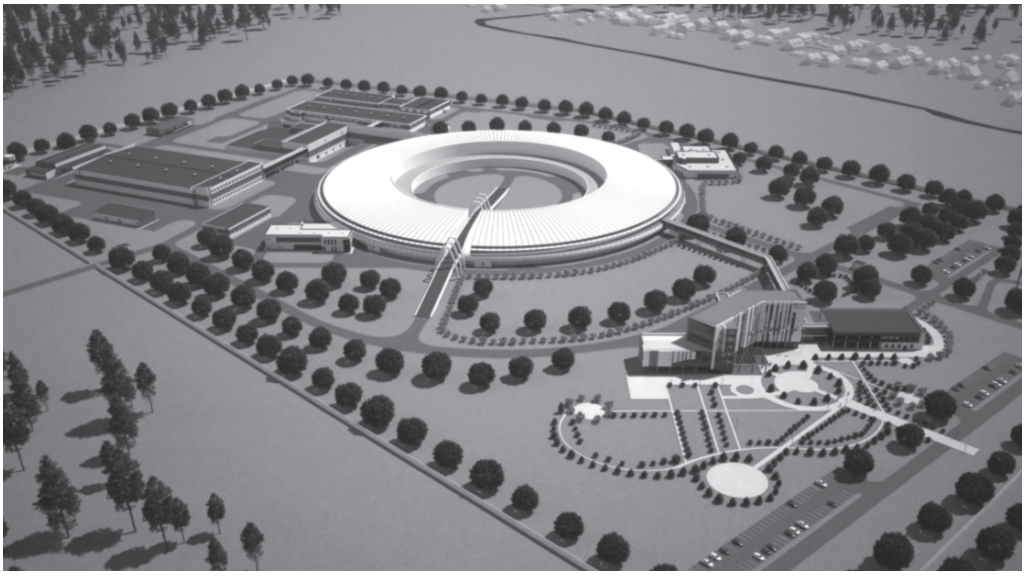


Рис. 22. Общий вид ЦКП “СКИФ”. На переднем плане административный корпус и столовая.

Таблица 17. Технологические требования к инженерным системам ЦКП “СКИФ”

Помещения с технологическим оборудованием	Температурный допуск (вода), °C	Температурный допуск (воздух), °C	Допуск колебаний магнитов, нм	
			2–10 Гц	10–100 Гц
Тоннель накопителя	±0.1	±0.1 (1 ч)	≤50	≤20
Экспериментальный зал	±1	±1	н/о	≤30
Каналы перепуска	±1	±1	≤150	
Тоннель бустера	±1	±1	≤150	
Линак	±1	±1	≤150	

жены элементы ускорителя, станций, электроники, уменьшение влияния электрических наводок и т.д. Особое внимание уделяют поперечной стабилизации магнитов накопителя из-за микросейсмических шумов природного или техногенного характера, поскольку вибрации магнитов приводят к увеличению эффективного эмиттанса пучка и ухудшению характеристик источника СИ. Технологические требования, предъявляемые к инженерным системам ускорительного комплекса и экспериментальных станций, приведены в табл. 17.

Предварительно отобранная строительная площадка комплекса была изучена на предмет природных и техногенных сейсмических шумов, включая землетрясения, взрывные работы карьеров и месторождений в радиусе до 500 км, железнодорожный и автотранспорт и другие шумы. Для наглядности на рис. 23 показана велосиграмма микросейсмических колебаний, вызванных движением поезда в 3 км от ЦКП “СКИФ”.

Для снижения вибрационных шумов разработана конструкция фундаментов и оснований под зданиями инжектора, накопителя и выносных станций СИ (рис. 24). Конструкция представляет собой многослойную структуру с горизонтальным расположением слоев, обладающих разными механическими свойствами и, соответственно, эффективно гасящими вибрации в разных диапазонах частот. По армированному слою грунта с бетонными сваями формируют двухслойную подушку из уплотненного цементированного грунта с пластифицирующими добавка-

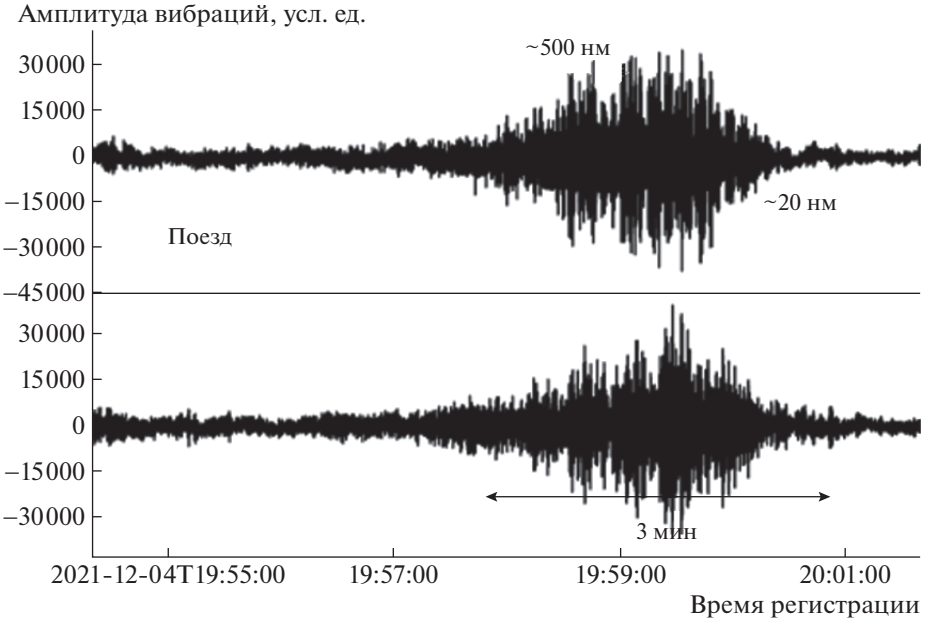


Рис. 23. Сигнал от сейсмодатчика, вызванный прохождением тяжело груженного поезда в 3 км от строительной площадки ЦКП “СКИФ”.

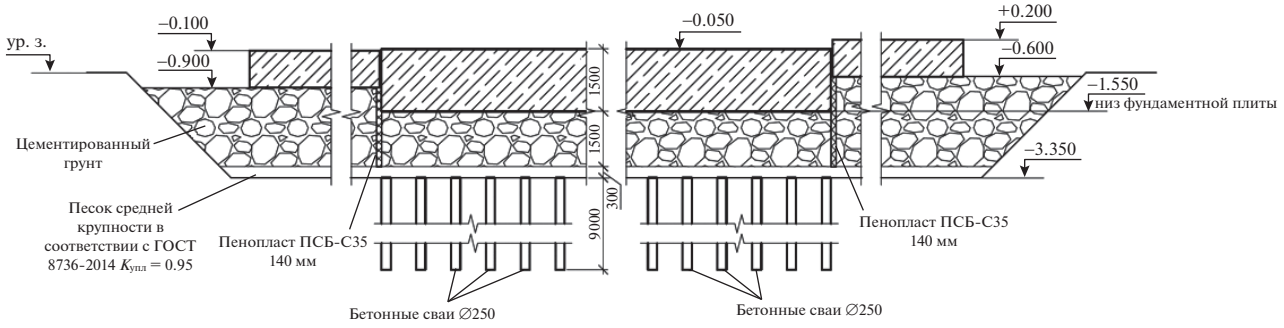


Рис. 24. Конструкция фундамента и оснований зданий ускорительного комплекса и выносных станций.

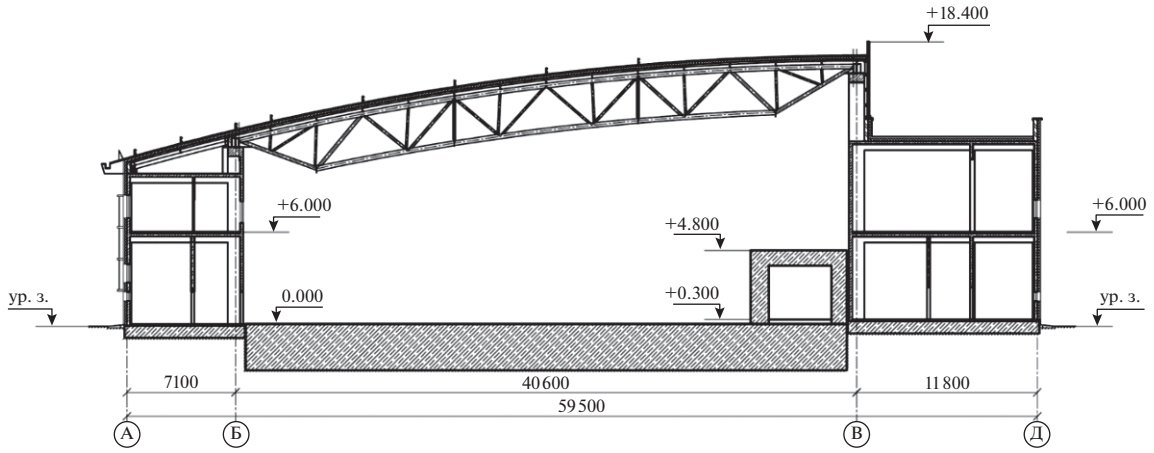


Рис. 25. Сечение здания накопителя.

ми и слоя песка, на которую кладут фундаментную плиту толщиной 1500 мм. По кромке плиты устанавливают пенопластовые вертикальные экраны, задерживающие прохождение сейсмических волн.

Фундаментная плита, на которой будут размещены ускорительный комплекс и станции СИ, отделена от фундаментов внутреннего (системы питания и обеспечения накопителя) и внешнего (офисные и лабораторные помещения) контуров здания накопителя (рис. 25).

Основные инженерные системы, обеспечивающие тепловой режим работы ускорительного комплекса, станций СИ и зданий в целом, спроектированы на базе современного высокоэффективного холодильного оборудования, работающего на фреоне. Применение современных решений позволяет уменьшить теплопотребление ЦКП “СКИФ” в 2 раза, обеспечивая рекуперацию тепла, выделяемого технологическим оборудованием во время работы источника СИ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Источник СИ поколения 4+ ЦКП “СКИФ” с эмиттансом, приближающимся к волновому пределу в области мягкого и среднего рентгеновского диапазона (~50–80 пкм·рад в зависимости от тока пучка, бетатронной связи и вставных устройств при энергии пучка электронов 3 ГэВ), успешно сооружается в г. Новосибирске. Описаны основные принципы реализации проекта, обсуждены его научная программа, ускорительный комплекс, исследовательская и инженерная инфраструктуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 621 с.
2. Undulators, Wigglers and Their Application / Eds. Elleaume P., Onuki H. London: Taylor & Francis, 2003.
3. *Maltseva Yu., Andrianov A., Astrelina K. et al.* VEPP-5 Injection Complex: New Possibilities for BINP Electron-Positron Colliders. Proc. IPAC2018, Vancouver, BC, Canada. P. 371.

4. *Gurov S., Akimov A., Anchugov O. et al.* Status of NSLS-II Booster. Proc. PAC2011, New York, NY, USA, WEP201, p. 1864.
5. *Баранов Г.Н., Богомягков А.В., Левичев Е.Б., Синяткин С.В.* // Сибирский физический журнал. 2020. Т. 15. № 1. С. 5.
6. *Baranov G., Bogomyagkov A., Levichev E. et al.* // Phys. Rev. Accel. Beams. 2021. V. 24. P. 120704.
7. http://madx.web.cern.ch/madx/
8. https://www.saesgetters.com/products-functions/products/neg-pumps%26vacuum-solutions
9. *Wang D.J., Chen J.R., Hsiung G.Y. et al.* // J. Vac. Sci. Tech. A. 1996. V. 14. P. 2624.
10. *Benvenuti C., Cazeneuve J.M., Chiggiato P. et al.* // Vacuum. 1999. V. 53. P. 219. https://doi.org/10.1016/S0042-207X(98)00377-7
11. *Kersevan R.* Performance of a Narrow-Gap, NEG-Coated, Extruded Aluminium Vacuum Chamber at the ESRF. Proc. EPAC-2000, 26–30 June, Vienna, Austria. P. 2289.
12. *Collins I.R., Ruzinov V.L., Malyshev O.B. et al.* A Photodesorption Study of a TiZrV Coated Stainless Steel Vacuum Chamber. Proc. EPAC-2002, Paris, France, June 2002. P. 2550.
13. *Абакумова Е.В., Анашин В.В., Balewski K. и др.* // Вакуумная техника и технология. 2011. Т. 21. № 2. С. 85.
14. *Анашин В.В., Жуков А.А., Краснов А.А., Семенов А.М.* // Приборы и техника эксперимента. 2009. № 6. С. 127.
15. *Khrushchev S., Mezentsev N., Lev V. et al.* Superconducting Multipole Wigglers: State of Art. Proc. IPAC2014, Dresden, Germany. P. 4103.
16. *Mezentsev N., Shkaruba V., Syrovatin V.* Superconducting Multipole Wigglers: Magnetic and Cryogenic Systems. 13th Cryogenics IIR Int. Conf.: Refrigeration Science and Technology. Prague, 2014. Iss. 1. P. 81.
17. *Tanaka T., Kitamura H.* // J. Synchrotron. Rad. 2001. V. 8. P. 1221. https://doi.org/10.1107/S090904950101425X

EDN: QBQMSW
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 766–770

УДК 548; 621.386; 621.382

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ НАКОПИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС “ЗЕЛЕНОГРАД” КАК ОСНОВА СОЗДАНИЯ ИНЖИНИРИНГОВОГО ЦЕНТРА ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ, МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ И БИОМЕДИЦИНСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

© 2022 г. М. В. Ковальчук[1], О. С. Нарайкин[1], М. Л. Занавескин[1,*]

[1] *Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия*

*****E-mail: zanaveskin.maxim@gmail.com*

Поступила в редакцию 08.04.2022 г.
После доработки 08.04.2022 г.
Принята к публикации 25.04.2022 г.

Город Зеленоград создавался как основной научно-производственный центр советской микроэлектронной промышленности. Зеленоградский микроэлектронный центр обеспечивал полный цикл работ по созданию отечественной микроэлектронной компонентной базы мирового уровня в интересах обороны и промышленности. Его ядром является специализированный источник синхротронного излучения – технологический накопительный комплекс (ТНК) “Зеленоград”, в проекте которого впервые предусматривается сопряжение работ аналитических синхротронных станций с технологическими линиями для выпуска специализированных интегральных схем. ТНК “Зеленоград” находится в высокой степени готовности к вводу в эксплуатацию, что позволит в кратчайшие сроки сформировать на его базе научно-производственный и научно-образовательный комплекс для освоения серийного производства и подготовки кадров в передовых областях техники и технологии.

DOI: 10.31857/S0023476122050149

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время уровень научного развития стран и регионов в мире во многом определяется наличием установок класса “мегасайенс”, в том числе ускорительных. Мировая практика демонстрирует, что наиболее развитые страны в сфере науки и инноваций имеют сеть центров синхротронных исследований, каждый из которых имеет свою специализацию с точки зрения решаемых задач [1]. В США в разное время работало восемь синхротронов, в Германии – семь, в Японии – пять. Специализация и решаемые задачи определяют оптимальные требования к техническим характеристикам каждого конкретного синхротрона [2].

При этом большинство передовых стран обладает технологическими источниками синхротронного излучения (**СИ**), работающими в интересах промышленности и обороны [3–6]. Доступ к таким синхротронам для внешних пользователей закрыт или осуществляется на коммерческой основе. Основная задача таких установок – трансфер исследований в экономику, развитие промышленного комплекса региона, повышение его конкурентоспособности. На сегодня в США функционируют три технологических синхротрона, в Европе – один, в Японии – один.

Предусмотренное Федеральной научно-технической программой развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 гг. создание национальной сети центров СИ, включающей в себя взаимодополняющие источники СИ, позволит обеспечить лидерство России в области разработки прорывных технологий и их ускоренного трансфера в экономику и социальную сферу, а также пространственное развитие страны [7].

Город Зеленоград создавался как основной научно-производственный центр советской микроэлектронной промышленности – сосредоточие уникальных высоких технологий, не имеющих мировых аналогов. Зеленоградский технологический центр обеспечивал полный цикл работ мирового уровня по созданию новой техники и технологий, в первую очередь новых материалов отечественной микроэлектронной компонентной базы в интересах обороны и промышленности [8].

Ядром зеленоградского центра должен был стать специализированный источник СИ – технологический накопительный комплекс (**ТНК**) “Зеленоград” на базе Научно-исследовательско-

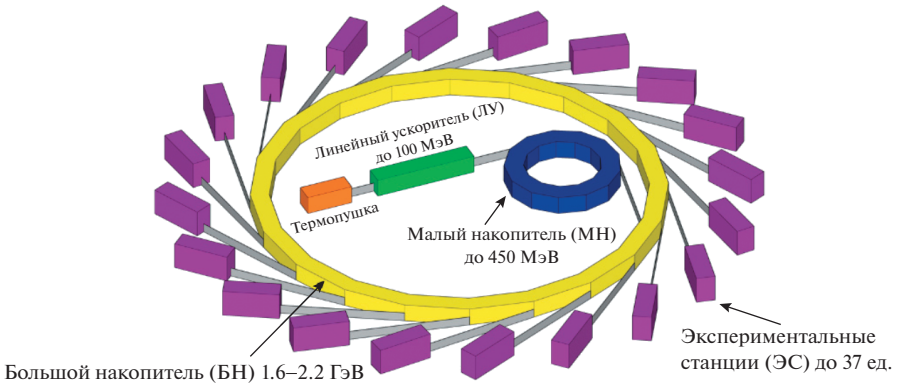


Рис. 1. Схема ТНК “Зеленоград”.

Рис. 2. Инжекционный комплекс (а) и большой накопитель (б) ТНК “Зеленоград”.

го института физических проблем (**НИИФП**) им. Ф.В. Лукина. Схема ТНК “Зеленоград” приведена на рис. 1. Строительство ТНК “Зеленоград” началось в 1984 г. и с периодическими остановками в силу различных причин велось вплоть до 2008 г., когда был введен в эксплуатацию инжекционный комплекс. Далее до 2013 г. на ТНК “Зеленоград” велись лишь выделенные работы по запуску отдельных узлов и систем установки. Инжекционный комплекс и большой накопитель ТНК “Зеленоград” приведены на рис. 2. Начиная с 2013 г. все работы на ТНК “Зеленоград” были приостановлены.

С учетом современных возможностей и тенденций развития синхротронных исследований спектр задач, решаемых ТНК “Зеленоград”, может быть существенно расширен и адаптирован для развития принципиально новых технологий XXI века. С учетом высокой степени готовности к вводу в эксплуатацию ТНК “Зеленоград” уже сегодня мог бы стать основой создания инжинирингового центра перспективных материалов, микроэлектроники и биомедицинских технологий для обеспечения исследований и разработок, ведущихся на базе военного инновационного технополиса “ЭРА” Минобороны России. План помещений ТНК “Зеленоград” приведен на рис. 3, а общий вид чистой технологической зоны – на рис. 4.

На базе ТНК “Зеленоград” практически сформирован не имеющий аналогов научно-технологический центр, который может занять ведущее положение в создании и внедрении в экономику страны прорывных технологий, включая биомедицинские (новые лекарственные препараты, биоматериалы для регенеративной медицины, биосовместимые нейроморфные системы и биосенсоры), а также принципиально новой микро- и наноэлектронной компонентной базы, аддитивных технологий, технологий робототехники и искусственного интеллекта.

Важнейшим преимуществом ТНК “Зеленоград” является то, что на одной площадке с ним находятся крупнейшие промышленные предприятия (ПАО ГК “Микрон”, АО “Ангстрем”, АО “НИИ “Субмикрон”, АО “НИИМЭ”, НИИТМ и др.),

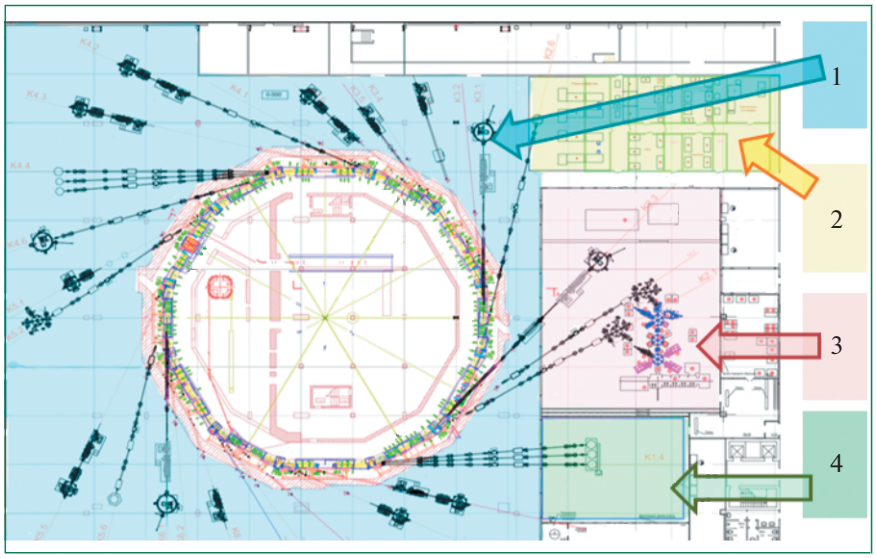


Рис. 3. План помещений ТНК “Зеленоград”: 1 – экспериментальный зал (серая зона, 2350 кв. м); 2, 3, 4 – чистые технологические зоны различной площади (200, 500 и 150 кв. м соответственно).

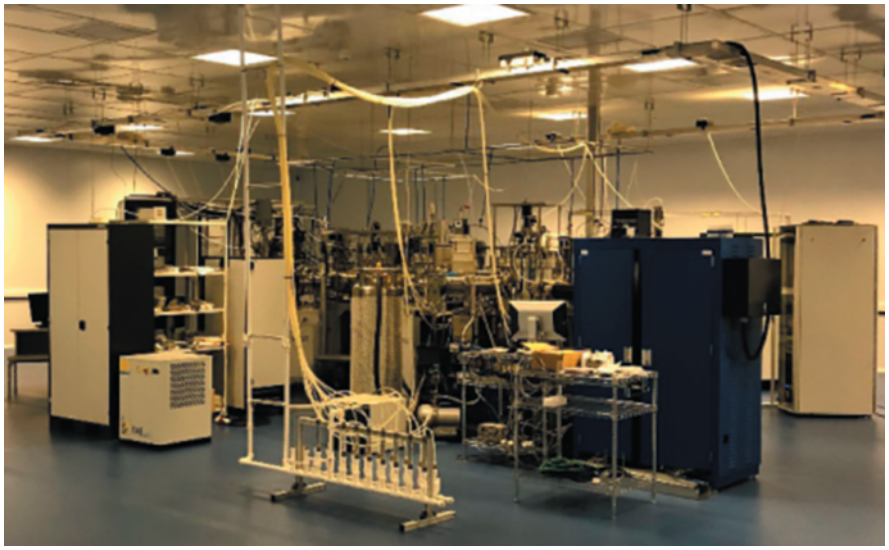


Рис. 4. Общий вид чистой технологической зоны.

способные освоить серийное производство разработок указанного центра, и НИУ “МИЭТ” – ведущий университет в области микро- и наноэлектроники, телекоммуникаций и информационных технологий. Таким образом, вокруг ТНК “Зеленоград” сформирован научно-образовательный и производственный комплекс, решающий задачу освоения серийного производства разработок указанного центра и подготовки кадров в самых передовых областях техники и технологии.

С целью максимально эффективной реализации потенциала синхротронных методов исследования, с одной стороны, и уникальных компетенций НИИФП им. Ф.В. Лукина, накопленных в результате многолетней работы в области микроэлектроники, сверхпроводящих материалов и метрологии, с другой стороны, предлагается создание на базе ТНК “Зеленоград” научно-технологического комплекса, предназначенного для развития следующих прорывных направлений научно-технической деятельности:

– создание сверхэнергоэффективных вычислительных нейроморфных систем (аппаратных ускорителей искусственного интеллекта, построенных на принципах работы мозга) на базе масси-

Таблица 1. Характеристики ТНК “Зеленоград”, которые будут достигнуты по итогам модернизации

Энергия, ГэВ	1.6–2.2
Ток пучка, мА	100–300
Горизонтальный эмиттанс, пм·рад	35000
Периметр источника, м	115.73
Максимальное число станций	37

вов мемристорных устройств (наноразмерных энергонезависимых ячеек аналоговой памяти);

– разработка новых СВЧ-устройств для инфокоммуникационных систем, систем связи и радиолокации, средств радиоэлектронной борьбы, силовой электроники;

– разработка элементной базы для сверхвысокопроизводительных процессоров, ориентированных на суперкомпьютеры с экстремально низким энергопотреблением, на основе низкотемпературных сверхпроводящих нанопроводов;

– разработка новых перспективных высокотемпературных сверхпроводящих материалов и токонесущих элементов на базе протяженных многослойных гетероструктур;

– создание методической и инструментальной базы метрологического обеспечения принципиально новых технологических процессов.

Ввод в эксплуатацию технологического синхротронного комплекса “Зеленоград” – центра “Московской технологической долины” – сыграет важную роль в консолидации потенциала сконцентрированных на севере Московской агломерации научных городов (Зеленограда, Фрязино, Менделеево и пр.) и крупных научно-производственных организаций (АО “НПП Исток им. Шокина”, ФГУП ВНИИФТРИ, ПАО “Микрон”, АО “Ангстрем”, АО “НИИ “Субмикрон”, ОАО “НПП “Пульсар”, ФГУП “НИИМА “Прогресс”, АО КРЭТ, ФГУП ВНИИОФИ и др.).

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ВВОДА В ЭКСПЛУАТАЦИЮ ТНК “ЗЕЛЕНОГРАД”

Основной целью ввода в эксплуатацию ТНК “Зеленоград” является обеспечение российских образовательных, научно-исследовательских и научно-производственных организаций и промышленных предприятий современным инструментом, обеспечивающим метрологическую и технологическую поддержку разработки и создания принципиально новых материалов, технологий и техники. Создание на базе ТНК “Зеленоград” современного инжинирингового центра обеспечит его резидентов эксклюзивным доступом к уникальному оборудованию, необходимому для реализации стратегии научного развития московского технополиса и единой программы научной деятельности. Характеристики ТНК “Зеленоград”, которые будут достигнуты по итогам модернизации, приведены в табл. 1.

Для достижения поставленной цели ТНК “Зеленоград” в результате ввода в эксплуатацию должен обеспечивать решение на мировом уровне следующих научных задач, соответствующих приоритетам научно-технологического развития России:

– создание принципиально новых технологических процессов, в том числе за счет возможностей сопряжения синхротронных станций с технологическими линиями, проведения сканирования объектов синхротронным пучком, выполнения технологических операций (например, литография);

– обеспечение контроля качества создаваемой продукции и проведение исследований в целях ускоренной оптимизации технологий и производственных процессов для создания перспективной отечественной электронной компонентной базы нового поколения, а также инновационных энергетических систем, включая природоподобные;

– обеспечение ускоренного поиска и разработки материалов, веществ, молекул, биологических систем, необходимых для создания конкретной инновационной продукции в сфере разработки прототипов лекарственных средств, эффективных вакцин, противовирусных лекарственных средств и других иммунобиологических препаратов для лечения инфекционных и онкологических заболеваний, а также материалов для регенеративной медицины, обеспечивающих переход к персонализированной медицине, высокотехнологичному здравоохранению и технологиям сбережения здоровья;

– обеспечение ускоренного трансфера знаний, научных исследований и разработок в экономику страны, создания и развития наукоемких производственных технологий и инновационной продукции.

Для обеспечения доступа пользователей, в том числе внешних организаций, ТНК “Зеленоград” должен работать с учетом следующих принципов:

– бесперебойность и надежность функционирования;

– возможность доступа для проведения исследований для российских организаций-пользователей вне зависимости от их территориальной удаленности;

– обеспечение постоянного контроля и совершенствования регламентов и интерфейсов взаимодействия;

– обеспечение в Российской Федерации бесперебойной работы не менее одного специализированного источника СИ в составе создаваемой сети мегаустановок в рамках Программы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящее время ТНК “Зеленоград” находится в высокой степени готовности к вводу в эксплуатацию, что дает реальную возможность в кратчайшие сроки сформировать на его базе научно-производственный и научно-образовательный комплекс, решающий задачу освоения серийного производства разработок указанного центра и подготовки кадров в самых передовых областях техники и технологии. Результатами ввода в эксплуатацию ТНК “Зеленоград” станут: формирование ключевого элемента национальной сети исследовательской инфраструктуры “мегасайенс” в Российской Федерации; обеспечение экспериментальных возможностей для проведения российскими научными коллективами синхротронных исследований по приоритетным направлениям научно-технологического развития России на источнике СИ третьего поколения, соответствующем всем современным стандартам в области “мегасайенс”; улучшение позиции Российской Федерации на мировом ландшафте синхротронных исследований и расширение сообщества квалифицированных пользователей СИ в целях последующего эффективного освоения установок класса “мегасайенс”.

Работа выполнена при финансовой поддержке Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Robinson A.L.* // Synchrotron Radiat. News. 2015. V. 28. № 4. P. 4. https://doi.org/10.1080/08940886.2015.1059228
2. *Belokrinitsky S., Churkin I., Oleynik A. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2009. V. 603. P. 16. https://doi.org/10.1016/j.nima.2008.12.119
3. SPring-8 Encyclopedia of Synchrotron Radiation Facilities – 2nd Edition. https://www.aps.anl.gov/spring-8-encyclopedia-of-synchrotron-radiation-facilities%E2%80%932nd-edition
4. *Mitchell E.P., Boller E., Gordon E.J. et al.* // Synchrotron Radiat. News. 2011. V. 24. № 6. P. 18. https://doi.org/10.1080/08940886.2011.634314
5. *Takeda Y.* // J. Phys. Conf. Ser. 2016. V. 712. P. 012146. https://doi.org/10.1088/1742-6596/712/1/012146
6. *Schell N.* // Synchrotron Radiat. News. 2017. V. 30. № 3. P. 29. https://doi.org/10.1080/08940886.2017.1316129
7. Развитие синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы. https://sn.ntr.ru
8. *Малашевич Б.М.* Очерки истории российской электроники. Вып. 5. М.: Техносфера, 2013. 800 с.

EDN: UFNCXF
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 771–784

УДК 548-1535-15544.22

ЛАЗЕРНО-СИНХРОТРОННЫЙ КОМПЛЕКС НИЦ “КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ”

© 2022 г. М. В. Ковальчук[1,2,3], М. М. Борисов[1], А. А. Гарматина[1], В. М. Гордиенко[2], А. М. Желтиков[2,5], В. В. Квардаков[1], В. Н. Корчуганов[1], И. А. Лихачёв[1], Е. И. Мареев[2,3], А. В. Митрофанов[1,4], М. М. Назаров[1,*], Э. М. Пашаев[1], Ф. В. Потёмкин[2], Я. О. Романовский[2], Е. Б. Руднева[3], Д. А. Сидоров-Бирюков[1,2], И. А. Субботин[1], М. В. Чащин[1], П. А. Щеглов[1], В. Я. Панченко[1,2,4]

[1] Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия
[2] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
[3] Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия
[4] Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН – филиал ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Шатура, Россия
[5] Факультет физики и астрономии, Техасский университет A & M, Колледж Стейшн, Техас, США
**E-mail: nazarov_mm@nrcki.ru*

Поступила в редакцию 16.03.2022 г.
После доработки 16.03.2022 г.
Принята к публикации 19.03.2022 г.

Лазерно-синхротронный комплекс (ЛСК) НИЦ “Курчатовский институт” (КИ) является уникальным исследовательским инструментом, объединившим беспрецедентные возможности нового и быстро развивающегося направления современной науки – физики сверхкоротких лазерных импульсов и сверхсильных электромагнитных полей, с уникальными диагностическими возможностями специализированного источника синхротронного излучения. В обзоре представлены результаты исследований в области генерации сверхсильных световых полей и взаимодействия таких полей с веществом, проведенных на ЛСК НИЦ КИ за последние несколько лет. Создан арсенал диагностических методов, разработаны принципы синхронизации источника синхротронного излучения и субпетаваттного лазерного комплекса, что позволяет решать задачи, связанные с динамикой структурной перестройки вещества со сверхмалым пикосекундным временным и атомным пространственным разрешением; получать новые знания в области сверхбыстрой временной динамики химических процессов и управления химическими реакциями; проводить исследование взаимодействия рентгеновского излучения, а также частиц, ускоренных до высоких энергий, с биологическими объектами; прототипировать эксперименты на рентгеновском лазере на свободных электронах (XFEL) и разрабатывать идейные платформы для участия российских ученых в работах на XFEL.

DOI: 10.31857/S0023476122050083

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение
1. Лазерно-синхротронный комплекс Курчатовского института
2. Эксперименты класса накачка–зондирование. Лазерно-индуцированное образование новых фаз кремния в нестационарных условиях
3. Управляемая генерация рентгеновского излучения: дистанционное и локальное воздействие на мишень
4. Нелинейно-оптическая конверсия в ТГц-диапазон с использованием широкоапертурных нелинейно-оптических кристаллов для достижения сверхсильного ТГц-поля
4.1. Режим двухцветной филаментации и генерация мощного ТГц-излучения в газе низкого давления
4.2. Новые подходы к получению экстремально высокой напряженности ТГц-поля с использованием нелинейно-оптического преобразования в широкоапертурных кристаллах
5. Генерация предельно коротких лазерных импульсов релятивистской интенсивности в режиме филаментации
Заключение

ВВЕДЕНИЕ

Развитие новых физических инструментов и методов анализа сложных структурных комплексов и их трансформаций отвечает актуальным задачам современной науки. Особую роль в проведении междисциплинарных исследований приобретает создание комбинированных исследовательских центров на основе рентгеновского [1] синхротронного [2] и лазерного излучений [3]. Такого рода научные центры объединяют уникальные возможности использования в диагностических целях электромагнитного излучения в широком спектральном диапазоне частот, в том числе синхротронного излучения (**СИ**) для исследования вещества в экстремальных условиях при воздействии сверхинтенсивных лазерных импульсов, когда напряженность оптического поля существенно превосходит уровень внутриатомных полей [4]. Появляется возможность не только моделировать ядерные и термоядерные реакции, но и управлять процессами в физических, химических и биологических системах на молекулярном уровне.

Движение атомов в материалах происходит в широком диапазоне временных и пространственных масштабов. За последнее столетие произошел прорыв в методах, позволяющих визуализировать движение атомов. Например, оптические методы, такие как фурье-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния света, оказываются чувствительными к колебательным степеням свободы и могут позволять извлекать важную информацию о структурном составе исследуемого вещества [5, 6]. За последние несколько десятилетий были предприняты значительные усилия, чтобы выйти за рамки этих подходов и разработать средства для прямого восстановления структуры материалов с разрешением на атомном уровне, в том числе в развитии методов, основанных на принципах рентгеновской кристаллографии, которые с успехом применяются и для структурного анализа замороженных биологически значимых молекул, а также для исследования промежуточных состояний, через которые проходят молекулы при трансформации [7]. В области физики твердого тела с помощью этих подходов можно получить непосредственную информацию о том, как движутся атомы, деформируются и перестраиваются элементарные ячейки, несмотря на тот факт, что шкала времени для этой динамики может составлять всего несколько десятков фемтосекунд (10^{-15}с), что сравнимо с периодом самых высокочастотных оптических фононов [8].

Лазерно-синхротронный комплекс (**ЛСК**) НИЦ “Курчатовский институт” (**КИ**) является уникальным исследовательским инструментом, объединившим беспрецедентные возможности нового и быстро развивающегося направления современной науки – физики сверхкоротких лазерных импульсов и сверхсильных электромагнитных полей, с уникальными диагностическими возможностями специализированного источника СИ. Научные исследования на базе этого комплекса развиваются по нескольким направлениям. Одно из них связано с применением субпетаваттной фемтосекундной титан-сапфировой (Ti : Sa) лазерной системы, позволяющей получать сверхсильные световые поля с напряженностью, превышающей внутриатомное поле (более 10^9 В/см). Работы сконцентрированы на следующих основных задачах: 1) развитие новых методов получения сверхкоротких спектрально ярких рентгеновских импульсов с высокой светимостью [9–12]; 2) генерация мощных импульсов электромагнитного поля в ТГц- и ГГц-диапазонах частот с экстремально высокой напряженностью, что существенно для развития ряда методик воздействия на вещество квазипостоянным сильным полем [13]; 3) разработка нового типа широкополосных источников электромагнитного излучения сверхкороткой длительности в широком спектральном диапазоне – от рентгеновского до терагерцового на основе нанокластерных струй; 4) изучение режимов множественной филаментации мощных лазерных импульсов с джоулевыми энергиями в разреженных средах [14], что существенно, например, для решения задач по транспортировке энергии в верхних слоях атмосферы; 5) генерация предельно коротких лазерных импульсов с длительностью порядка нескольких циклов поля и субджоулевыми энергиями [15]; 6) разработка методов ускорения электронов лазерным полем; 7) получение пучков высокоэнергетичных протонов и нейтронов при облучении тонкопленочных и кластерных мишеней лазерными импульсами мульти-тераваттной мощности; 8) визуализация микроструктур в протонных пучках; 9) развитие фемтосекундных технологий, связанных с использованием процесса филаментации, для диагностики состава вещества и дистанционных методов доставки мощного излучения; 10) получение новых знаний в области сверхбыстрой временной динамики химических процессов и управления химическими реакциями; 11) исследование взаимодействия рентгеновского излучения, а также частиц, ускоренных до высоких энергий, с биологическими объектами; 12) прототипирование экспериментов с использованием рентгеновского лазера на свободных электронах (**XFEL**) и разработка идейных платформ для участия российских ученых в работах на XFEL [1].

Другое направление связано с комплексными исследованиями, основанными на принципе накачка–зондирование, в которых в качестве пробных импульсов используется СИ [1, 3]. Данное направление позволяет решать задачи, связанные

с изучением динамики структурной перестройки вещества со сверхмалым пикосекундным временным и атомным пространственным разрешением, в том числе исследование сверхбыстрого воздействия рентгеновского и оптического импульсов на вещество, включая полупроводники, управление свойствами которых особенно важно, например, для высокочастотной интегральной ИК-фотоники [16, 17].

Данный обзор содержит краткое описание проведенных исследований на ЛСЦ НИЦ КИ, в том числе представление первых экспериментальных данных, полученных с использованием синхронного рентгено-оптического воздействия на вещество, изложение будущих направлений, а также областей, в которых методы фемтосекундного воздействия и мультиспектральной диагностики могут оказать значительное влияние на решение материаловедческих задач.

1. ЛАЗЕРНО-СИНХРОТРОННЫЙ КОМПЛЕКС КУРЧАТОВСКОГО ИНСТИТУТА

Лазерно-синхротронный комплекс Курчатовского института образован на базе источника СИ поколения 2+ и уникальной лазерной системы на кристаллах Ti : Sa субпетаваттного уровня мощности. В соответствии с утвержденной Правительством РФ Федеральной научно-технической программой “Развитие синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы” первостепенными задачами ЛСК стали исследования в области лазерной генерации импульсного фемтосекундного рентгеновского излучения, поиск оптимальных способов транспортировки сверхмощного лазерного излучения между станциями Курчатовского источника синхротронного излучения (**КИСИ**) и работы по частотной синхронизации импульсов излучения лазерного и синхротронного комплексов.

КИСИ представляет собой источник СИ с горизонтальным излучением 98 нм рад. Периметр главного кольца 124.13 м. Рабочая магнитная структура источника СИ представляет собой модифицированную структуру типа **DBA** (Double Bend Achromat) и состоит из шести суперпериодов, каждый из которых содержит два прямолинейных участка по 3 м для установки высокополевых сверхпроводящих вигглеров и ВЧ-резонаторов (промежутки с нулевой дисперсией), слабополевых вигглеров, элементов системы инжекции (промежутки с ненулевой дисперсией) [1].

В настоящее время на комплексе работают 13 экспериментальных станций и строятся еще четыре. Синхротронное излучение из поворотных магнитов с полем 1.7 Тл обеспечивает СИ с критической энергией фотонов ~7.1 кэВ для большей части линий пучка. Спектральный диапазон СИ составляет от 0.1 до 2000 Å.

Обычно эксперименты проводятся при энергии электронов 2.5 ГэВ, токе электронов в накопителе 100–200 мА и времени жизни электронов 20–40 ч. Среднеквадратичные поперечные размеры и угловые разбросы пучка электронов в точке излучения (для станции “Фаза”) равны: $\sigma_x = 305$, $\sigma_z = 43$ мкм, $\sigma'_x = 0.417$, $\sigma'_z = 0.030$ мрад. Эксперименты на станции “Фаза” проводились в диапазоне энергий фотонов 8–12 кэВ, оптимальном для получения пучка фотонов с максимальной интенсивностью на образце около 10^{13} фотонов/мрад/(0.1%BW/100мА/с).

Субпетаваттный источник лазерного излучения обладает уникальным в России набором технических характеристик и функциональных возможностей, обеспечивает промежуточные уровни пиковой мощности, заполняющие разрыв между лазерными комплексами класса рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL) и лазерными системами мощностью в единицы тераватт, работающими в ряде крупных международных лабораторий, что позволяет масштабировать и проверять экспериментальные задачи, предлагаемые к реализации на установках мегакласса. Лазерный источник в НИЦ КИ имеет следующие характеристики: центральная длина волны – 800 нм, ширина спектра 750–850 нм, минимальная длительность импульса 25 фс, частота следования импульсов 10 Гц, энергия в импульсе – до 7 Дж (рис. 1а). Имеется возможность выбирать и плавно перестраивать мощность выходных импульсов от субтераваттного до субпетаваттного уровня путем управления характеристиками и числом лазеров накачки, а также с помощью поляризационного аттенюатора, расположенного между главным усилителем и компрессором. Возможность управления спектральной шириной и фазой лазерных импульсов обеспечивается акустооптическими модуляторами света Mazzler и Dazzler.

В основе идеи создания ЛСК НИЦ КИ лежит концепция проведения экспериментов по принципу накачка–зондирование: при этом интенсивный лазерный импульс создает нестационарное состояние вещества, а слабый импульс рентгеновского диапазона, приходящий с контролируемой задержкой, “зондирует” текущее состояние, вызванное первым оптическим импульсом. В настоящее время широко распространены времяразрешенные эксперименты, проводимые по данному принципу, в которых возбуждающий (силовой) и сканирующий (пробный) импульсы лежат в оптическом интервале частот и создаются лазерной системой [18]. Пространственное разрешение в такой экспериментальной

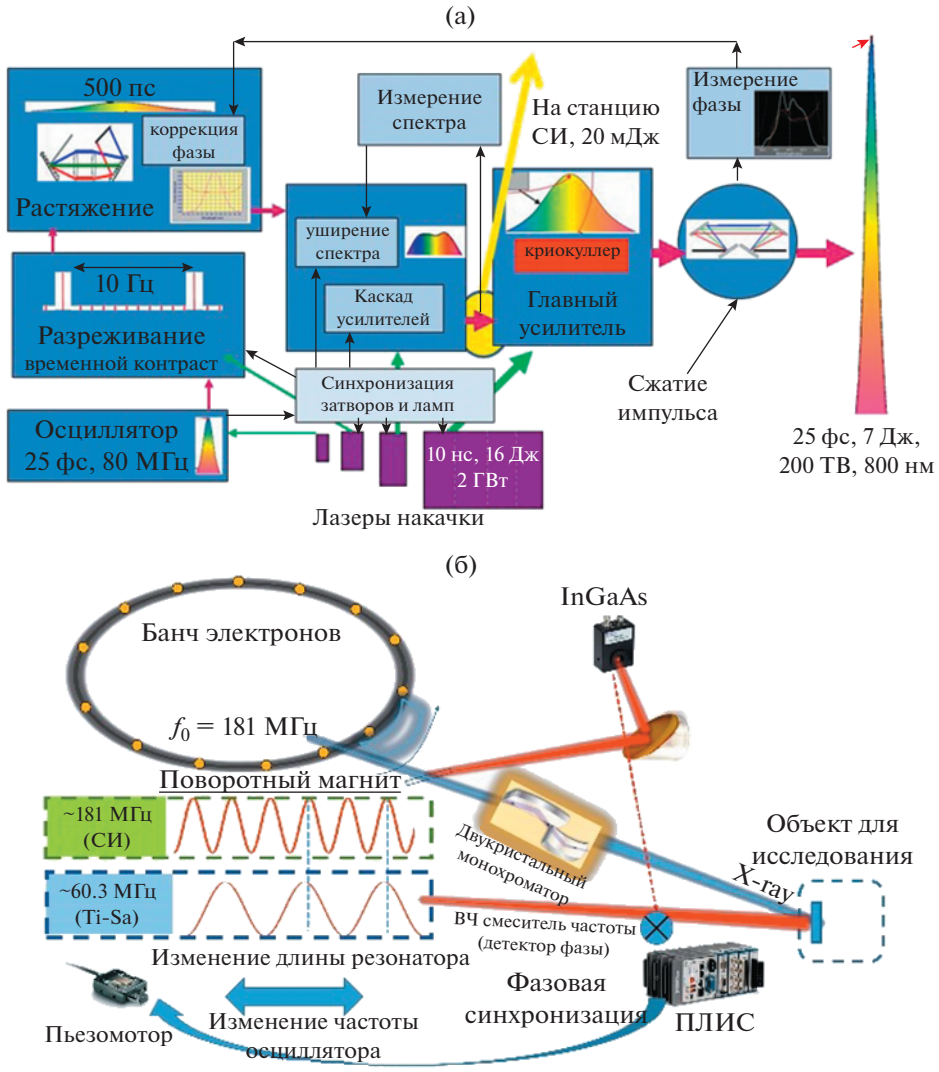


Рис. 1. Схематическое изображение лазерно-синхротронного комплекса: субпетаваттная лазерная система (а), синхротронный источник и система синхронизации (б).

схеме определяется длиной волны пробных импульсов, что для оптического излучения соответствует субмикронному масштабу, а временно́е – длительностью сканирующего импульса. Однако исследуемые образцы могут быть непрозрачны для лазерного излучения видимого и ближнего ИК-диапазона, что делает невозможным использование классических методов времяразрешенной диагностики лазерно-индуцированных изменений в материале. По сравнению с оптическим диапазоном рентгеновское излучение является уникальным инструментом с субангстремной пространственной разрешающей способностью и проникающей способностью, определяемой глубиной экстинкции, составляющей для данного диапазона длин волн ~10–100 мкм. Как правило, за счет этого рентгеновское излучение используется для визуализации движения атомов в сложных органических и неорганических материалах, а также широко используется для диагностики фазовых переходов, в том числе в экспериментах по принципу накачка–зондирование [19, 20]. Таким образом, проведение экспериментов, в которых роль накачки отводится интенсивному лазерному импульсу, а зондирование осуществляется коротким импульсом рентгеновского диапазона, позволяет использовать высокие проникающие и разрешающие способности рентгеновского излучения для мониторинга лазерно-индуцированного нестационарного состояния вещества [21]. В качестве источника рентгеновского излучения можно использовать лазеры на свободных электронах (**FEL**), а также источники СИ, синхронизованные с лазерной системой. FEL-лазеры работают на низкой частоте повторения, поэтому синхронизировать их импульсы с излучением

лазерной системы относительно просто. В то же время синхронизация сверхкороткого лазерного импульса с излучением источника СИ является гораздо более сложной задачей. В этом случае необходимо жестко "привязать" частоту лазерного осциллятора к частоте обращения электронных банчей. С другой стороны, наличие последовательности импульсов СИ позволяет за один выстрел лазерной системы получить информацию об эволюции образцов в субмикросекундном масштабе времен. Расстояние между зондирующими импульсами составляет ~400 нс и при регистрации сигнала от каждого импульса из представленной последовательности имеется возможность проследить за трансформацией исследуемого объекта с шагом, определяемым расстоянием между зондирующими импульсами.

В ЛСК для изучения динамики нестационарных структурных изменений в материалах, индуцированных субпетаваттной фемтосекундной лазерной системой и наносекундными лазерными источниками, может использоваться СИ и излучение лазерно-плазменного источника рентгеновского диапазона [3]. Временно́е разрешение данной системы варьируется от сотен микросекунд до пикосекунд в диапазоне энергий фотонов 3–30 кэВ. Основой времяразрешенных экспериментов служит уникальная система синхронизации, основанная на программируемых логических интегральных схемах (**ПЛИС**) и фазовой автоподстройке частоты (**ФАПЧ**). В любом случае экстремальное состояние вещества индуцируется либо прямым лазерным воздействием (абляцией), либо при создании ударной волны в буферной среде. В качестве источника рентгеновского излучения выступает синхротронный или лазерно-плазменный источник. Синхронизация лазера и источников рентгеновского излучения достигается простой оптической линией задержки (в случае лазерно-плазменного источника) или сложной системой синхронизации. Мощный лазерный импульс используется в качестве силового импульса, а рентгеновский – в качестве зондирующего. Для каждой временно́й задержки между импульсами регистрируется дифракционная картина рентгеновских лучей или их поглощение. Изменение спектра рентгеновского поглощения или рентгенограмма соответствуют модификации внутренней структуры мишени, эволюционирующей при варьировании временно́й задержки.

Рентгенооптические эксперименты проводятся на экспериментальной станции фазочувствительных методов исследования вещества "Фаза" КИСИ.

Схемы синхронизации фемто- и наносекундных лазерных импульсов с источником рентгеновского излучения принципиально различаются. Для синхронизации наносекундных лазерных систем с источником СИ используется оригинальная система синхронизации на базе ПЛИС, которая прореживает опорный сигнал (2.415 МГц) до 5 Гц. Сигналы частотой 5 Гц подаются на запуск лампы накачки и электронно-оптического затвора наносекундного лазера с необходимыми временными задержками между ними. Для синхронизации с фемтосекундной лазерной системой используется ФАПЧ, которая обеспечивает подстройку частот синхротрона и лазерного осциллятора путем компенсации разности фаз между ними. Для этого с учетом текущей разности фаз изменяется длина лазерного резонатора, что приводит к изменению периода следования лазерных импульсов и, соответственно, подстройке их частоты (и фазы) к синхротронной.

В любом случае системы синхронизации изменяют задержку с шагом 5 нс. Поскольку электронные сгустки на источнике СИ следуют друг за другом с периодом 411 нс, для проведения временно́й диагностики необходимо изменять задержку в диапазоне 0–411 нс. Таким образом, суммирование рентгенодифракционных сигналов по 82 различным задержкам позволяет восстановить полную картину изменения рентгенодифракционного сигнала во времени. Изменение временно́й задержки и регистрация полезного сигнала полностью автоматизированы. Между лазерными импульсами образец перемещается с помощью моторизованного столика пятикружного гониометра. Рентгеновские кривые качания измеряются по схеме θ–2θ.

Таким образом, созданный комплекс открывает возможность проведения рентгеновской диагностики сверхбыстрых лазерно-индуцированных экстремальных состояний вещества с высоким временным и пространственным разрешением.

2. ЭКСПЕРИМЕНТЫ КЛАССА НАКАЧКА–ЗОНДИРОВАНИЕ. ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОЕ ОБРАЗОВАНИЕ НОВЫХ ФАЗ КРЕМНИЯ В НЕСТАЦИОНАРНЫХ УСЛОВИЯХ

В рамках работ, проводимых на ЛСК, создан экспериментальный стенд, позволяющий не только восстановить динамику изменения кристаллической решетки образца, подвергшейся воздействию коротких и ультракоротких лазерных импульсов во временно́м масштабе от сотен фемтосекунд до микросекунд, но и определить влияние лазерно-индуцированного давления и температуры на процесс перестройки и разрушения кристаллической решетки материала. Отметим, что при импульсном воздействии интенсивного лазерного излучения на вещество принципиально важной становится скорость изменения давления и температуры в области воздействия как при

вводе энергии в объем, так и при ее релаксации, а не только финальные значения данных величин, что важно в стационарных условиях сжатия и нагрева материала. Для фемтосекундного воздействия скорость ввода энергии в объем может составлять $\sim 10^{32}$ K/c, а скорость изменения давления $\sim 10^{17}$ атм./с, что характеризует создание сильно неравновесного экстремального состояния вещества, динамика релаксации которого будет сильно отличаться от стационарных, квазистационарных и адиабатических условий ввода энергии в материал и будет зависеть от длительности используемых лазерных импульсов. Для этого проводится сравнение динамики трансформации кристаллической решетки при различных длительностях лазерного (нс или фс) импульса и режимах воздействия (с использованием буферной среды или при прямом процессе лазерной абляции). При наносекундном лазерном воздействии непосредственно на исследуемый образец достигается максимальная температура кристаллической решетки, а в случае фемтосекундной абляции достигается максимальное давление, однако температура кристаллической решетки попрежнему выше температуры плавления. В случае использования буферных сред лазерно-индуцированного нагрева кристаллической решетки не происходит, однако давление, достигаемое в этом случае, ниже, чем при прямом процессе лазерной абляции.

В проведенных экспериментах использовались наносекундные (6 нс) и фемтосекундные лазерные импульсы (~50 фс) для инициирования фазовых переходов в режиме как *post-mortem*, так и времяразрешенных измерений. Методами рентгеновской *post-mortem*-диагностики исследованы кристаллы кремния, подвергнутые воздействию высокоинтенсивных фемтосекундных лазерных импульсов ближнего ИК-диапазона, что позволило понять возможные конечные результаты преобразования структуры кремния. Так, при воздействии высокоинтенсивного ($\sim 10^{14}$ Вт/см^2) фемтосекундного лазерного излучения ближнего ИК-диапазона (1.24 мкм) с длительностью ~100 фс и энергией импульса от 0.25 до 1.5 мДж на поверхности кремния Si-I образуется поликристаллическая метастабильная фаза Si-III, а также Si-XII, Si-IX [17]. Данные фазы в основном обнаружены на периферии абляционного кратера. При воздействии лазерного импульса длительностью 6 нс на кремний обнаружен иной набор фаз: Si-III и Si-XI. Это говорит о различающихся режимах воздействия, а именно о различии в ширине фронта ударной волны и температурах решетки.

С помощью рентгенооптической диагностики с временным разрешением впервые в России исследована динамика кристаллической решетки кремния под действием интенсивных наносекундных лазерных импульсов (интенсивность до 10^{11} Вт/см^2, длительность ~6 нс) во временном масштабе до ~500 мкс с наносекундным временным разрешением. В отличие от оптических методов жесткое рентгеновское излучение (7.8 кэВ) позволяет “заглянуть” (на глубину ~10–100 нм) под “пену” аблированных интенсивным лазерным излучением неупорядоченных фрагментов материала мишени, образующихся на поверхности образца. Продемонстрировано, что релаксация кристаллической решетки кремния проходит в три этапа. В субнаносекундном масштабе времени происходят быстрые фазовые переходы в *b*-Sn-фазу на всем фронте ударной волны. После прохождения ударной волны решетка начинает возвращаться в исходное состояние, однако из-за процесса плавления кремния при температуре в несколько тысяч градусов, инициируемой лазерным импульсом, окончательная перестройка кристаллической решетки кремния после наносекундного лазерного воздействия заканчивается только через ~300 мкс (рис. 2). Высокая температура кристаллической решетки могла существенно повлиять на новообразованные фазы Si-III, Si-XI, Si-XII, возникшие при распространении лазерно-индуцированной ударной волны в объеме материала в микросекундном временно́м масштабе. Фазы, которые можно наблюдать в режиме *post-mortem*, сильно зависят от параметров лазерного импульса, определяющих баланс между давлением, инициирующим фазовые переходы, и температурой, которая может разрушить эти фазы. При этом новые фазы кремния были зарегистрированы только на периферии облученных образцов, где температура ниже, чем в центре, но давление достаточно велико для существования фазовых переходов. На данный момент фемтосекундное лазерное воздействие оказывается более подходящим для изучения сверхбыстрых фазовых переходов из-за возможности реализации сильно нестационарных условий ввода лазерной энергии в вещество, что позволяет *post-mortem* регистрировать больше “новых” фаз и, соответственно, получать более детальную структурную информацию о материале, с чем и связываются перспективы дальнейших времяразрешенных исследований.

3. УПРАВЛЯЕМАЯ ГЕНЕРАЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ: ДИСТАНЦИОННОЕ И ЛОКАЛЬНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА МИШЕНЬ

Источники сверхкоротких импульсов рентгеновского диапазона, включая источники синхротронного типа, позволяют проводить прямые измерения быстропротекающих процессов по схе-

ме рассеяния в экспериментах, связанных с изучением структуры вещества.

Комбинация фемтосекундного лазерного (или пикосекундного терагерцового) возбуждения со сверхкроткими импульсами рентгеновского дифракционного зонда позволяет осуществлять прямой мониторинг перемещений атомов в элементарной ячейке. ЛСК КИ позволяет использовать для рентгеноструктурного анализа не только СИ, но и фемтосекундные яркие рентгеновские импульсы, получаемые при взаимодействии мощного лазерного излучения с поверхностью металлической мишени.

Для повышения эффективности генерации рентгеновского излучения (**РИ**) в лазерных экспериментах используют различные методы, в том числе чирпирование импульсов накачки, подбор мишеней, оптимизацию геометрии облучения, выбор состава и давления окружающего газа, использование поликапиллярных линз для коллимации и фокусировки при доставке РИ к исследуемому образцу. В ранних экспериментах с малыми энергиями лазерных импульсов (субтераваттная мощность излучения) была показана возможность удаленной генерации РИ на поверхности металла при атмосферном давлении с помощью лазерного монофиламента [10]. При этом генерируется как тормозное, широкополосное РИ, так и характеристическое, узкополосное РИ. “Филаментационная” методика воздействия на мишень может также использоваться как диагностическая, основанная на анализе регистрируемых спектральных линий ионизованного вещества по схеме лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии (техника **LIBS**).

Повысить лазерную интенсивность выше уровня 10^{14} Вт/см^2 при атмосферном давлении мешает ионизация воздуха. Замена воздуха гелием при атмосферном давлении [12] позволяет получать интенсивность лазерного излучения на мишени до 10^{16} Вт/см^2.

Сочетание режима управления длительностью фемтосекундных лазерных импульсов и гелиевого поддува в область микроплазмы, зажигаемой на медной мишени, осуществлено впервые. Данный способ позволил оптимизировать условия эффективной генерации РИ субпикосекундной длительности и получить максимальный поток K_α-фотонов 2×10^7 фот./имп./2π ср. с эффективностью конверсии 10^{-5} [12]. Такая величина потока достаточна для измерений РИ-дифракции на полупроводниковых кристаллах.

При повышении лазерной интенсивности до уровня 10^{16} Вт/см^2 спектр тормозного излучения смещается в область высоких энергий (20–100 кэВ), и доля характеристического излучения возрастает [22]. Для дальнейшего увеличения интенсивности на мишени и, соответственно, выхода K_α-фотонов требуется понижать давление окружающего газа; при этом можно использовать преимущества доставки лазерного излучения в виде монофиламента для удаленной генерации

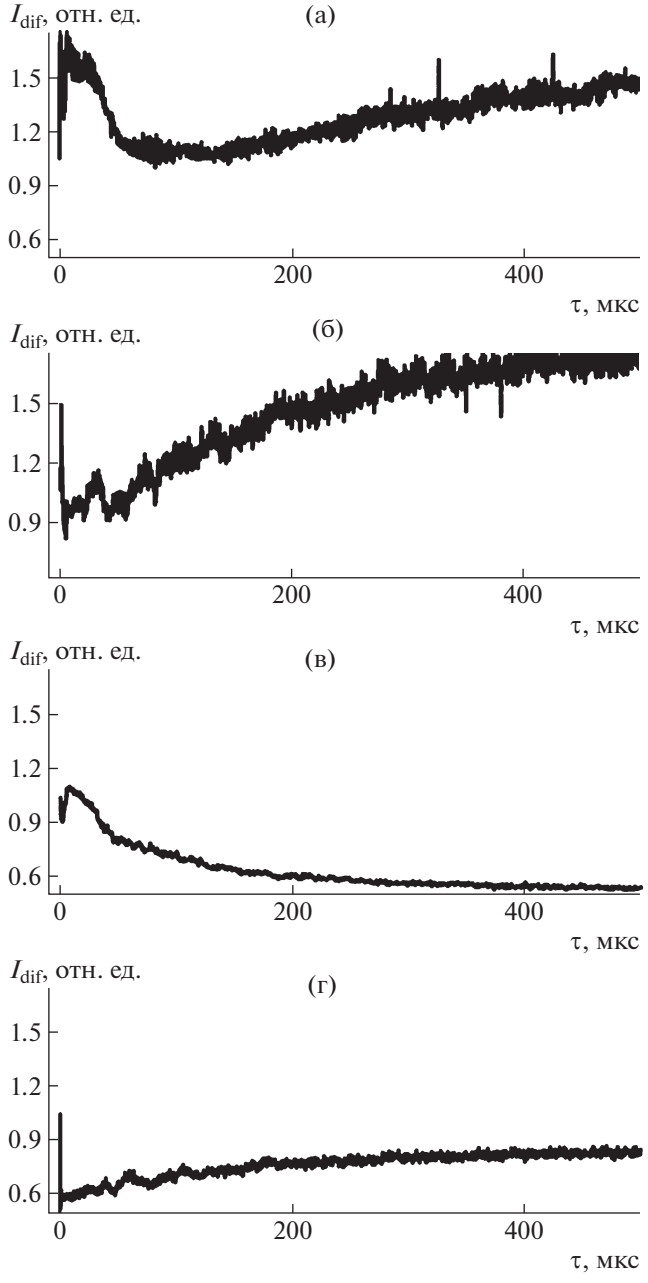


Рис. 2. Зависимость нормированной интегральной интенсивности I_{dif} дифрагированного рентгеновского пучка в направлении главного рефлекса кристалла Si от временно́й задержки τ между воздействующим лазерным и зондирующим рентгеновским импульсами, измеренная при угловых отстройках от максимума главного рефлекса кристалла Si 40″ (а), 10″ (б), 5″ (в) и 0″ (г). Энергия лазерного импульса – 12 мДж, длительность – 6 нс, фокусировка линзой с фокусным расстоянием 20 см, нормальное падение на образец.

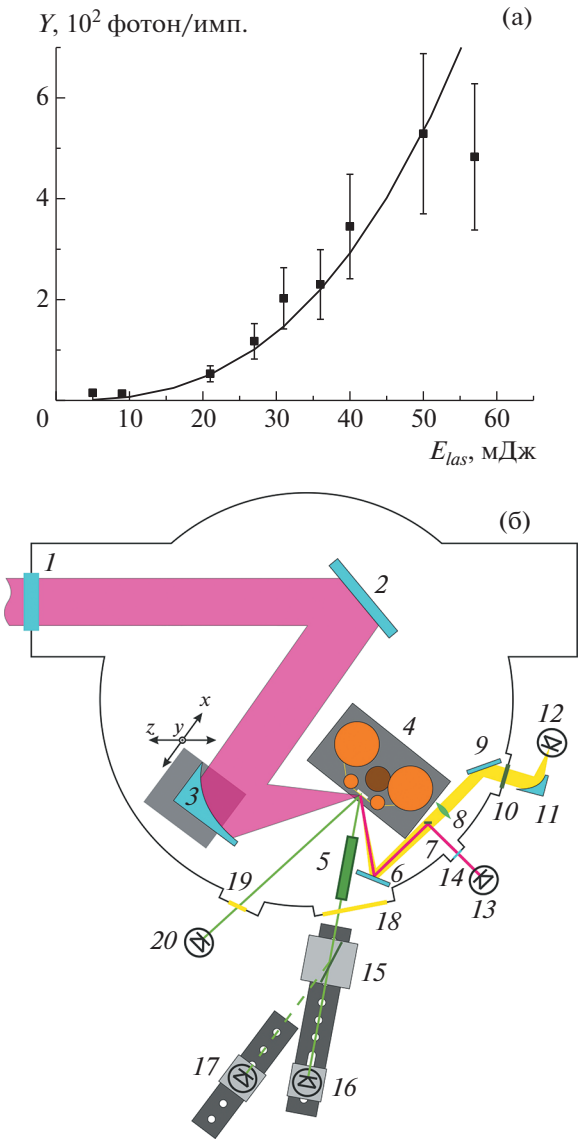


Рис. 3. Зависимость выхода характеристического рентгеновского излучения Y после дифракции на кристалле кремния в телесный угол 1.2×10^{-5} ср. Сплошной кривой представлена аппроксимация зависимости степенной (показатель 2.7) функцией (а). Схема эксперимента (б): *1* – входное окно (толщина 10 мм); *2* – диэлектрическое поворотное зеркало; *3* – параболическое фокусирующее зеркало (диаметр 3 дюйма, фокусное расстояние 15 см); *4* – металлическая мишень на основе лентопротяжного механизма; *5* – поликапиллярная рентгеновская линза; *6*, *9* – поворотные зеркала; *7* – малая пластина для вывода видимого излучения из центральной части пучка; *8* – коллимирующая линза (фокусное расстояние 10 см); *10* – кремниевое окно (толщина 7 мм); *11* – фокусирующее зеркало; *12* – ячейка Голея; *13* – спектрометр видимого диапазона; *14* – выходное окно; *15* – кристалл кремния; *16*, *17* – рентгеночувствительные фотоумножители для регистрации прошедшего (*16*) и дифрагирующего (*17*) рентгеновского излучения, *18*, *19* – бериллиевые окна, *20* – энергодисперсионный рентгеновский спектрометр.

РИ с использованием мультитераваттных лазерных импульсов [9]. Выход РИ и скорость абляции мишени могут быть использованы для мониторинга лазерной интенсивности в определенных точках филамента, куда вдвигается металлическая мишень, для измерения длины и диаметра филамента.

При переходе в вакуум появляется возможность использовать лазерные импульсы с большей энергией и фокусировать их параболическим зеркалом с меньшим фокусным расстоянием, что позволяет увеличить интенсивность излучения на поверхности мишени на несколько порядков. Схема экспериментов представлена на рис. 3б. Излучение с длиной волны 800 нм и энергией до 60 мДж фокусировали 15-сантиметровым параболическим зеркалом на поверхность медной ленты, протягиваемой перпендикулярно падающему лазерному лучу таким образом, чтобы каждый новый “выстрел” приходился на неповрежденную поверхность. Генерируемое РИ собиралось поликапилярной линзой, выводилось через бериллиевое окно и дифрагировало на кристалле кремния Si(111). Прошедшее и дифрагируемое РИ регистрировалось рентгеночувствительными фотоумножителями в реальном времени. При данных условиях эксперимента выход K_α-РИ-фотонов составил до 10^8 фот./имп. 2π ср. При этом в дифрагировавшем на пластине кремния импульсе РИ содержалось более 5×10^2 фот./имп. (рис. 3а), что позволяет надежно зарегистрировать импульс и использовать его для рентгеноструктурного анализа быстропротекающих процессов. Вместе с РИ регистрировались спектральный состав отраженного излучения в видимой области спектра и энергия генерируемых импульсов в ТГц-диапазоне.

Выполненные эксперименты продемонстрировали возможность проведения исследований по методу накачка–зондирование, в которых зондирующие импульсы РИ получены в результате взаимодействия мощных лазерных импульсов с поверхностью металлических мишеней.

4. НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКАЯ КОНВЕРСИЯ В ТГЦ-ДИАПАЗОН С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ШИРОКОАПЕРТУРНЫХ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ ДЛЯ ДОСТИЖЕНИЯ СВЕРХСИЛЬНОГО ТГЦ-ПОЛЯ

Генерация мощных импульсов электромагнитного поля в ТГц-диапазоне частот имеет первостепенную важность в задачах медицинской физики и биофизики, а также для развития терагерцовой нелинейной оптики, и ускорения частиц. Проводимые на ЛСК НИЦ КИ работы нацелены на повышение напряженности поля од-

ноперiодных ТГц-импульсов до уровня, при котором становится возможным модифицировать структуру твердых тел. Одноперiодные ТГц-импульсы с высоким пиковым полем (>1 МВ/см) позволяют изучать нестационарное ТГц-возбуждение в твердых телах [23]. Преимущество ТГц-импульса по сравнению с оптическим состоит в отсутствии осцилляций, накоплении эффекта воздействия, а также в высокой пондеромоторной энергии для ускорения или смещения ионов и электронов. Это позволяет эффективно воздействовать на материал без его разрушения.

Наиболее эффективными способами генерации ТГц-излучения при использовании лазеров мультитераваттного уровня мощности являются, во-первых, генерация в газовой плазме оптического пробоя при низком давлении с двухцветной накачкой [14] и, во-вторых, оптическое выпрямление в нелинейном кристалле большой апертуры [13].

4.1. Режим двухцветной филаментации и генерация мощного ТГц-излучения в газе низкого давления

Генерация мощного терагерцового излучения в режиме двухцветной филаментации (800 + + 400 нм) тераваттных лазерных импульсов [24] требует использования специальных кристаллов для получения привязанных по фазе импульсов на удвоенной лазерной частоте. Доминирующий механизм получения ТГц-излучения в данной схеме обусловлен образованием поперечного, квазипостоянного фототока [25].

В лаборатории процессов кристаллизации ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН были выращены кристаллы дигидрофосфата калия KH_2PO_4 (**KDP**), из которых изготовлены уникальные сверхтонкие широкоапертурные пластины для удвоения частоты излучения лазерных импульсов пиковой мощностью до 20 ТВт с длительностью на уровне 20–25 фс. Кристаллизационные растворы синтезировали с использованием KDP (ос.ч). Кристаллы выращивали скоростным методом в термостатируемом 10-литровом кристаллизаторе на точечной затравке, закрепляемой на вращающейся платформе, при снижении температуры в интервале от 65 до 25°C. Точность поддержания температуры составляла ±0.01°C. Рост кристаллов проводили при пересыщении 7% в течение трех недель, в результате получили кристаллы высокого оптического качества, не содержащие включений, размером до 120 × 120 мм^2. Из них были вырезаны пластины размером 60 × 60 мм^2, толщиной 300 и 400 мкм, а также 20 × 20 мм^2 с толщиной 150 и 250 мкм.

Важным параметром является стойкость кристаллов KDP к продолжительному воздействию лазерного излучения мультитераваттной мощности. Данные кристаллы подвергались многочасовому воздействию лазерных импульсов длительностью 30 фс и частотой повторения 10 Гц. Лазерное излучение фокусировали диэлектрическим зеркалом с фокусным расстоянием 250 см, его интенсивность можно было варьировать путем изменения положения кристалла относительно фокуса линзы. Экспериментально было установлено, что для фемтосекундных лазерных импульсов критическая интенсивность лазерного излучения составляет 0.3 ТВт/см^2, что соответствует плотности энергии ~10 мДж/см^2. При такой интенсивности кристалл менял окраску после 10^5 лазерных импульсов (3 ч непрерывной работы лазерной системы). При увеличении интенсивности в 2 раза до 0.6 ТВт/см^2 кристалл толщиной 250 мкм разрушался из-за неоднородности теплового нагрева по поперечному сечению пучка. Тем не менее проведенные эксперименты продемонстрировали возможность использования кристаллов KDP для широкополосного, эффективного преобразования во вторую гармонику излучения с мощностью до 20 ТВт.

Принципиальная схема двухцветной генерации мощного ТГц-излучения при оптическом пробое газа низкого давления показана на рис. 4. Для генерации второй гармоники кристалл KDP 20 × 20 мм размещали в кювете с газом низкого давления на специальном узле соосно с основным пучком. Для оптимизации процесса при помощи магнитов осуществляли продольное перемещение кристалла вдоль кюветы. Лазерный пучок фокусировали диэлектрическим зеркалом с фокусным расстоянием 250 см. Кристалл для генерации второй гармоники располагали таким образом, чтобы интенсивность прошедшего через него излучения не превышала критическую. Эффективность преобразования лазерного излучения во вторую гармонику составляла ~5%. В вакуумной камере на выходе из трубы устанавливали кремниевый фильтр, блокирующий мощное лазерное излучение, но прозрачный для ТГц-излучения. В качестве фильтров использовали полипропилен и тефлон. Генерируемое ТГц-излучение коллимировали параболическим зеркалом с фокусным расстоянием 20 см и затем фокусировали вторым параболическим зеркалом с фокусным расстоянием 15 см в ячейку Голея для регистрации после выхода из вакуумной камеры через кремниевое окно.

В качестве низкочастотных фильтров (пропускающих ТГц-частоты <1 ТГц) использовали толстые блоки тефлона, полиэтилена и оргстекла, высокочастотных – пластинки легированного кремния с разной проводимостью. Пропускание всех фильтров было прописано на FTIR- и THZ-TDS-спектрометрах, что позволило получить представление о спектральном составе гене-

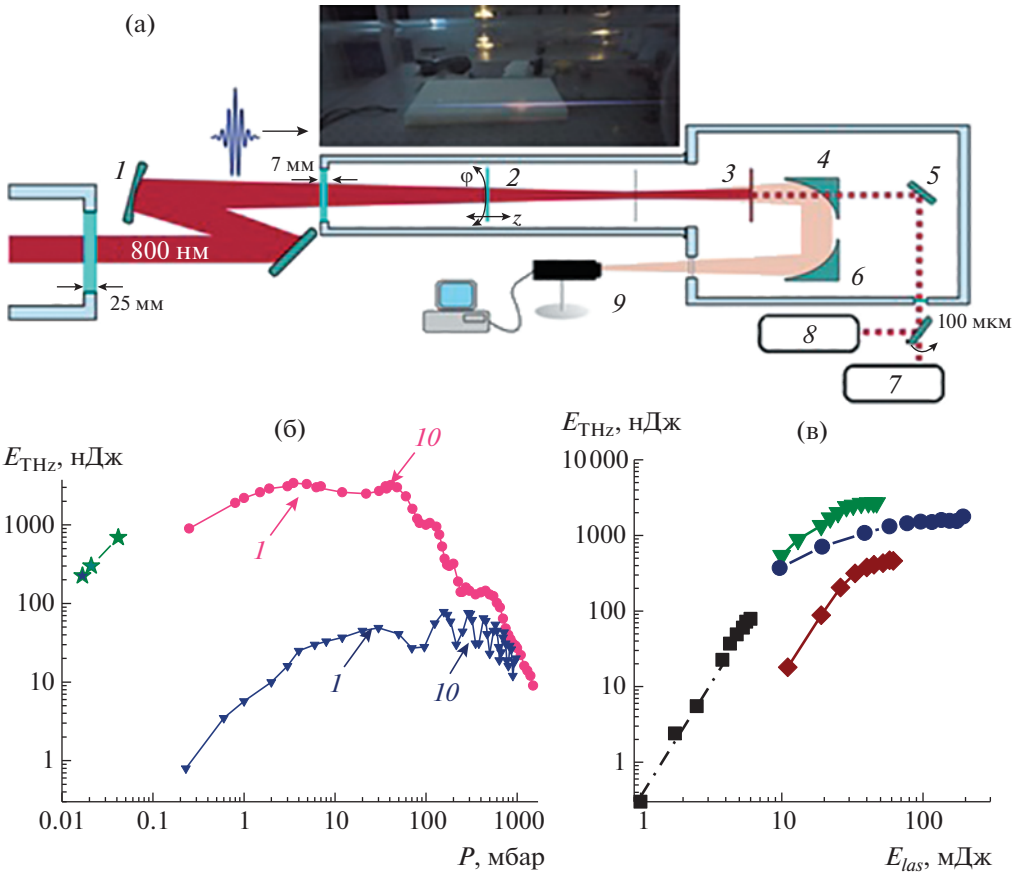


Рис. 4. Схема эксперимента (а): *1* – фокусирующее сферическое зеркало (фокусное расстояние 250 см); *2* – кристалл KDP; *3* – набор фильтров для блокировки лазерного излучения; *4*, *6* – параболические зеркала для сбора ТГц-излучения; *5* – поворотное зеркало для вывода лазерного излучения на диагностику; *7* – система характеризации лазерного излучения на основе оптического стробирования с разрешением по частоте (FROG); *8* – спектрометр; *9* – ячейка Голея. На вставке фотография плазменного канала в фокусе лазерного излучения. Зависимость энергии ТГц-импульсов E_{THz} от давления газа P в кювете для различных пиковых мощностей лазерных импульсов (б) (10 ТВт – звездочки, 1 ТВт – кружки, 0.15 ТВт – треугольники); *1* – давление, при котором мощность лазерных импульсов равна критической мощности, *10* – давление, при котором мощность лазерных импульсов в 10 раз превосходит критическую мощность. Зависимость энергии ТГц-импульсов E_{THz} от энергии лазерного излучения E_{las} при различных давлениях газа p и расстояниях между кристаллом KDP для генерации второй гармоники и центром области пробоя z (в): квадраты – p = 150 мбар, z = 15 см; треугольники – p = 42 мбар, z = 40 см; ромбы – p = 1.4 мбар, z = 75 см; кружки – p = 0.1 мбар, z = 90 см; штрихпунктирная линия – аппроксимация кубической функцией.

рируемого ТГц-излучения, а также о полной энергии ТГц-импульса. В экспериментах кювету заполняли азотом, атмосферным воздухом или аргоном. Все эти газы продемонстрировали сравнимую эффективность генерации ТГц-излучения и зависимость от экспериментальных параметров. Для низкочастотной части излучения (<1 ТГц) также была проведена оценка ширины ТГц-спектра посредством метода электрооптического детектирования. Длительность ТГц-импульсов составила 0.5 пс, а ширина спектра – 2 ТГц. Методом фильтрации высокочастотных спектральных компонент было показано наличие ТГц-энергии вплоть до 6 ТГц.

В [14] были найдены наилучшие соотношения давления, энергии и положения кристалла второй гармоники для наиболее эффективной генерации ТГц-излучения. Найденные соотношения для пиковой мощности лазерного излучения 1 ТВт (40 мДж, 40 фс) и давления азота 20 мбар позволили получить ТГц-импульс с энергией 4 мкДж и шириной спектра до 6 ТГц, при этом максимальная эффективность преобразования составила 8×10^{-5}.

Таким образом, при понижении давления газа от атмосферного до десятка миллибар на два порядка увеличивается энергия ТГц-излучения, при этом пиковое поле составляет ~1 МВ/см. Предполагается, что этому способствует, во-первых, ослабление поглощения ТГц-излучения плазмой пробоя, а во-вторых, увеличение длины когерентности внутри плазменного канала за счет

уменьшения дисперсии видимого излучения, а также увеличения диаметра канала.

При оптическом пробое в газе, который находится при низком давлении, спектр генерируемого электромагнитного излучения не ограничивается ТГц-диапазоном: значимая часть энергии располагается в более низкочастотном ГГц-диапазоне [26]. В наших экспериментах максимальная амплитуда ГГц-поля (3 В) наблюдалась при использовании одноцветной накачки с энергией импульса 60 мДж и давлении азота 0.1 мбар. Основным механизмом генерации ГГц-излучения являются продольные токи [26]. Сверхбыстрое лазерно-плазменное взаимодействие тераваттных лазерных импульсов с газом приводит к возникновению ГГц- и ТГц-излучений, измерение поляризации которых может служить чувствительным методом исследования лазерной электродинамики плазмы, помогающим обнаруживать симметрию плазменных токов и признаки множественной ионизации.

4.2. Новые подходы к получению экстремально высокой напряженности ТГц-поля с использованием нелинейно-оптического преобразования в широкоапертурных кристаллах

В последнее время все более широкое применение находит получение ТГц-импульсов методом оптического выпрямления ультракоротких лазерных импульсов в нелинейно-оптическом кристалле. Используемый в данном методе кристалл должен обладать существенной нелинейностью и иметь высокую лучевую прочность. Для использования в тераваттных лазерных системах апертура кристалла должна быть максимально большой, чтобы избежать повреждения кристалла мощными лазерными импульсами, а его толщина малой для сохранения широкополосности преобразования.

КПД преобразования лазерного излучения в терагерцовое в известных нелинейных кристаллах составляет ~10^{-4}, в рекордных случаях до 10^{-2}. Ожидается, что в прочных кристаллах данный метод позволит преобразовать фемтосекундные лазерные импульсы с энергией ~600 мДж в однопериодные электромагнитные импульсы ТГц-диапазона с энергией до 60 мкДж.

В качестве кристалла с фазовым синхронизмом для генерации ТГц-излучения от Ti : Sa-лазерных систем использовали кристалл селенида галлия GaSe [27] толщиной 300 мкм, апертурой 3 × 3 $см^2$. Его лучевая прочность для данных лазерных систем составляет ~100 $ГВт/см^2$ (0.01 $Дж/см^2$), что позволяет применять его для преобразования лазерных импульсов с энергией 20 мДж. При этом средняя энергия ТГц-импульсов составляет 0.3 мкДж. Такие энергии импульсов можно использовать в нелинейных ТГц-экспериментах [28]. Экспериментальные данные по генерации ТГц-излучения в нелинейно-оптических кристаллах и в газе представлены на рис. 5. Высокое двулучепреломление GaSe позволяет эффективно перестраивать спектр ТГц-излучения путем изменения наклона кристалла относительно направления распространения лазерного излучения, в том числе получать крайне высокие ТГц-частоты 12–15 ТГц с большой энергией [29].

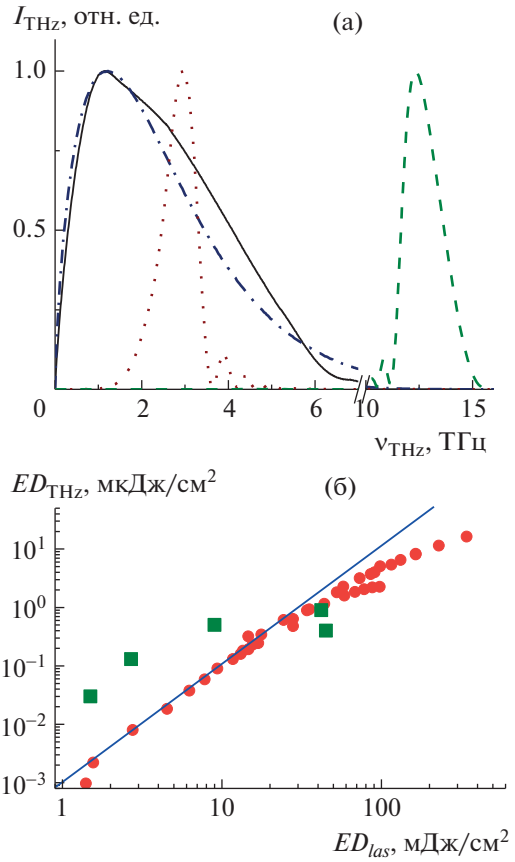


Рис. 5. Спектральная интенсивность ТГц-излучения I_{THz} при генерации в кристаллах НЛ толщиной 200 мкм (штрихпунктирная линия); селенида галлия толщиной 700 мкм, наклон главной оси кристалла 10° (пунктирная линия) и 50° (штриховая линия) относительно направления распространения лазерного излучения. Для сравнения приведена спектральная интенсивность ТГц-излучения, генерируемого в газе низкого давления (сплошная линия). По оси абсцисс отложена частота ТГц-излучения ν_{THz} (а). Зависимость ТГц-плотности энергии $ED_{ТГц}$ от плотности энергии накачки ED_{las} для кристалла НЛ толщиной 200 мкм (кружки) и селенида галлия толщиной 700 мкм (квадраты) (б).

Другой перспективной средой для генерации однопериодных ТГц-импульсов с большой энергией являются кристаллы ниобата лития (**НЛ**) $LiNbO_3$. Благодаря высокой прочности и отсутствию двухфотонного поглощения они оказались

более подходящими для преобразования мощных лазерных импульсов и получения высокоинтенсивных однопериодных импульсов ТГц-поля, несмотря на отсутствие синхронизма и сильное ТГц-поглощение [30]. Далее мы экспериментально определили оптимальную интенсивность лазерного излучения на поверхности кристалла НЛ, позволяющую преобразовывать лазерные импульсы с энергией 250 мДж в однопериодный ТГц-импульс с энергией 10 мкДж и широким, гладким спектром, содержащим 40% энергии на частотах выше 3 ТГц. Увеличение интенсивности лазерного излучения более 2–4 ТВт/см^2 не приводит к возрастанию ТГц-сигнала из-за ограничивающих эффективность преобразования нелинейных процессов (рис. 5б), в частности из-за трехфотонного поглощения и фазовой самомодуляции. Максимальная энергия ТГц-импульса, которую можно получить с каждого 1 см^2 площади НЛ, составляет ~ 3мкДж.

Изменяя длительность накачки, в кристалле НЛ можно плавно перестраивать ширину ТГц-спектра от 1 до 6 ТГц [13]. Для длительности накачки в 30 фс удалось получить ТГц-импульс с энергией 10 мкДж, при этом пиковая интенсивность ТГц-импульса в терминах электрического поля составила 5 МВ/см. Большая доступная площадь позволяет получать высокую итоговую энергию ТГц-импульса при достаточной мощности лазерной системы. Несинхронная генерация в тонком слое НЛ позволяет получать существенно более широкополосные и короткие ТГц-импульсы по сравнению с другими методами.

В результате проведенных исследований получены простые соотношения энергии, длительности импульса и диаметра пучка, при которых энергия лазерных импульсов оптимальным образом масштабируется площадью нелинейного кристалла. Зарегистрированы однопериодные импульсы в ТГц-диапазоне частот с рекордной величиной напряженности поля 5 МВ/см. Показана возможность использования фемтосекундных лазерных импульсов мультитераваттной мощности для генерации электромагнитного излучения ТГц-диапазона с выходной плотностью энергии ~10 мкДж/см^2. Проведенные исследования позволят оптимизировать размер нелинейно-оптических кристаллов для генерации сверхмощных однопериодных ТГц-импульсов в режиме высоких энергий фемтосекундной лазерной накачки.

5. ГЕНЕРАЦИЯ ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ В РЕЖИМЕ ФИЛАМЕНТАЦИИ

Явление лазерно-индуцированной филаментации [31] является многообещающим для решения задач передачи электромагнитного излучения высокой мощности на большие расстояния [32–34], спектрального уширения мощных сверхкоротких лазерных импульсов [35], а также удаленного зондирования атмосферы [36]. В оптике сверхкоротких лазерных импульсов это явление может использоваться для временно́й компрессии импульсов [37–40], что позволяет генерировать фазово-стабилизированные оптические волновые формы длительностью вплоть до одного периода осцилляции поля в очень широком диапазоне длин волн, простирающемся от ультрафиолета [41] до ближнего и среднего ИК-диапазона [42]. Однако при существенном увеличении энергии лазерного импульса возникают сложности с нестабильностью высокоинтенсивного лазерного пучка по отношению к малым вариациям интенсивности в поперечном профиле пучка, а также пространственным вариациям оптических свойств среды [43], что приводит к образованию сложной структуры множественных филаментов [35].

Было предложено использование газа низкого давления в качестве среды для образования филамента и временно́й компрессии импульсов субпетаваттного уровня мощности [35, 44]. Давление газа выбиралось таким образом, чтобы избежать явления множественной филаментации. Кроме этого, для управления балансом между самофокусировкой за счет эффекта Керра и плазменной дефокусировкой и достижения оптимальных условий компрессии импульсов использовалась полная ионизация внешней валентной оболочки атомов.

Излучение Ti : Sa-лазера с длительностью ~30–35 фс и энергией до 0.3 Дж, что соответствует пиковой мощности до 10 ТВт, направляли в кювету с газом, давление в которой менялось от 0.001 мбар до 2 бар. Лазерное излучение выводили из вакуумного компрессора через оптическое окно толщиной 25 мм, затем фокусировали сферическим зеркалом с фокусным расстоянием 250 см и направляли в кювету через окно толщиной 7 мм. Излучение выводили из кюветы в вакуумный компрессор на основе чирпированных зеркал через окно толщиной 2 мм [15]. Выходные импульсы характеризовали с помощью метода оптического стробирования с разрешением по частоте. Подбор давления газа в кювете и размера пучка на оптических окнах давали возможность управления спектральным уширением импульсов для их последующего сжатия. Таким образом, была продемонстрирована возможность создания

масштабируемой по энергии многокомпонентной линии трансформации лазерного пучка, в которой суб – 40 фс – тераваттные волновые формы преобразуются в пространстве и времени для последующего сжатия до нескольких периодов поля. Точная характеристика формы лазерных импульсов, выполненная в нескольких местах на пути луча, показывает, что, несмотря на всю сложность нелинейно-оптических процессов, волновые формы короче трех циклов поля могут быть доставлены к месту взаимодействия лазера с веществом, что позволяет реализовать обширный класс исследований взаимодействия сверхсильного лазерного поля с веществом.

Генерация предельно коротких импульсов (один–два цикла поля) релятивистской интенсивности позволит генерировать мощные аттосекундные импульсы в рентгеновском диапазоне спектра и проводить эксперименты типа накачка–зондирование с аттосекундным временным разрешением, где в качестве как импульса накачки, так и зондирующего импульса используются аттосекудные импульсы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Созданная материально-техническая база, выполненные в настоящее время исследования в Лазерно-синхротронном комплексе НИЦ КИ, разработанные методы и полученные научные результаты заложили базу для проведения широкого класса прорывных исследований по ряду перспективных научных направлений, ориентированных на получение экстраординарных результатов, которые не только сформируют новые научные знания, но и создадут основу для развития инновационных технологий.

Часть работ по фемтосекундному РИ и генерации ТГц-излучения выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2021-1358 от 12 октября 2021 г. Часть работ по времяразрешенной рентгено-оптической диагностике лазерно-индуцированных фазовых переходов в полупроводниках выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) (гранты № 18-02-40018 и 19-29-12037). Часть работ по оптической диагностике фазовых переходов в материалах выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы в рамках научного проекта № 21-32-70021. Часть работ по генерации сверхширокополосного суперконтинуума и сверхкоротких волновых форм выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации “Росатом” в рамках научного проекта № 20-21-00140.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ковальчук М.В., Благов А.Е.* Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах // Кристаллография. 2022. Т. 67. № 5. С.
2. *Korchuganov V., Blokhov M., Kovalchuk M. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2005. V. 543. P. 14. https://doi.org/10.1016/j.nima.2005.01.022
3. *Potemkin F.V., Mareev E.I., Garmatina A.A. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 2021. V. 92. P. 1. https://doi.org/10.1063/5.0028228
4. *Mourou G.* // Rev. Mod. Phys. Am. Phys. Soc. 2019. V. 91. P. 30501. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.91.030501
5. *Zheltikov A.M.* // J. Raman Spectrosc. 2000. V. 31. P. 653. https://doi.org/10.1002/1097-4555(200008/09)31:8/9<653::AID-JRS597>3.0.CO;2-W
6. *Pupeza I., Huber M., Trubetskov M. et al.* // Nature. 2020. V. 577. P. 52. https://doi.org/10.1038/s41586-019-1850-7
7. *Shymanovich U., Nicoul M., Sokolowski-Tinten K. et al.* // Appl. Phys. B. 2008. V. 92. P. 493. https://doi.org/10.1007/s00340-008-3138-8
8. *Tsujino M., Sano T., Sakata O. et al.* // J. Appl. Phys. 2011. V. 110. P. 1. https://doi.org/10.1063/1.3673591
9. *Nazarov M.M., Shcheglov P.A., Chaschin M.V. et al.* // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1692. P. 012018. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1692/1/012018
10. *Garmatina A.A., Nazarov M.M., Zhvaniya I.A. et al.* // Laser Phys. Lett. 2019. V. 16. P. 025401. https://doi.org/10.1088/1612-202X/aaf6a2
11. *Garmatina A.A., Zhvaniya I.A., Potemkin F.V., Gordienko V.M.* // Quantum Electron. 2018. V. 48. P. 648. https://doi.org/10.1070/QE2012v042n11ABEH015030
12. *Гарматина А.А., Назаров М.М., Щеглов П.А. и др.* // Оптика и спектроскопия. 2022. Т. 130. С. 522. https://doi.org/10.21883/OS.2022.04.52266.64-21
13. *Nazarov M.M., Shcheglov P.A., Teplyakov V.V. et al.* // Opt. Lett. 2021. V. 46. P. 5866. https://doi.org/10.1364/OL.434759
14. *Nazarov M., Mitrofanov A.V., Sidorov-Biryukov D.A. et al.* // J. Infrared, Millimeter, Terahertz Waves. 2020. V. 41. P. 1069. https://doi.org/10.1007/s10762-020-00689-z
15. *Mitrofanov A.V., Sidorov-Biryukov D.A., Voronin A.A. et al.* // Opt. Commun. 2022. V. 502. P. 127311. https://doi.org/10.1016/j.optcom.2021.127311
16. *Mareev E.I., Rumiantsev B.V., Potemkin F.V.* // JETP Lett. 2020. V. 112. P. 739. https://doi.org/10.1134/S0021364020230095
17. *Пашаев Э.М., Корчуганов В.Н., Субботин И.А. и др.* // Кристаллография. 2021. Т. 66. С. 877. https://doi.org/10.31857/S0023476121060242
18. *Sokolowski-Tinten K., von der Linde D.* // J. Phys. Condens. Matter. 2004. V. 16. P. R1517.
19. *Brennan Brown S., Gleason A.E., Galtier E. et al.* // Sci. Adv. 2019. V. 5. https://doi.org/10.1126/sciadv.aau8044

20. *McBride E.E., Krygier A., Ehnes A. et al.* // Nature Phys. 2019. V. 15. P. 89. https://doi.org/10.1038/s41567-018-0290-x
21. *Lindenberg A.M., Johnson S.L., Reis D.A.* // Annu. Rev. Mater. Res. 2017. V. 47. P. 425. https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070616-124152
22. *Zhavoronkov N., Bargheer M., Gritsai Y. et al.* // Opt. InfoBase Conf. Pap. 2005. V. 30. № 13. P. 1737. https://doi.org/10.1364/OL.30.001737
23. *Kampfrath T., Tanaka K., Nelson K.A.* // Nature Photonics. 2013. V. 7. P. 680. https://doi.org/10.1038/nphoton.2013.184
24. *Kuk D., Yoo Y.J., Rosenthal E.W. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 108. P. 121106. https://doi.org/10.1063/1.5020889
25. *Kim K.-Y., Glownia J.H., Taylor A.J., Rodriguez G.* // Opt. Express. 2007. V. 15. P. 4577. https://doi.org/10.1364/OE.15.004577
26. *Mitrofanov A.V., Voronin A.A., Nazarov M.M. et al.* // Phys. Rev. A. 2021. V. 104. 043522. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.104.043522
27. *Bereznaya S.A., Korotchenko Z.V., Redkin R.A. et al.* // J. Opt. 2017. V. 19. P. 115503. https://doi.org/10.1088/2040-8986/AA8E5A
28. *Leitenstorfer A., Nelson K.A., Reimann K., Tanaka K.* // New J. Phys. 2014. V. 16. 045016. https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/4/045016
29. *Sell A., Leitenstorfer A., Huber R.* // Opt. Lett. 2008. V. 33. P. 2767. https://doi.org/10.1364/OL.33.002767
30. *Jang D., Sung J.H., Lee S.K. et al.* // Opt. Lett. 2020. V. 45. P. 3617. https://doi.org/10.1364/OL.393913
31. *Couairon A., Mysyrowicz A.* // Phys. Rep. 2007. V. 441. P. 47. https://doi.org/10.1016/j.physrep.2006.12.005
32. *Mitrofanov A.V., Voronin A.A., Sidorov-Biryukov D.A. et al.* // Opt. Lett. 2014. V. 39. P. 4659. https://doi.org/10.1364/OL.39.004659
33. *Mitrofanov A.V., Sidorov-Biryukov D.A., Voronin A.A. et al.* // Phys.-Usp. 2015. V. 58. P. 89. https://doi.org/10.3367/UFNE.0185.201501H.0097
34. *Voronin A.A., Mitrofanov A.V., Sidorov-Biryukov D.A. et al.* // J. Opt. 2018. V. 20. P. 025504. https://doi.org/10.1088/2040-8986/AA9BCC
35. *Zhokhov P.A., Panchenko V.Y., Zheltikov A.M.* // Phys. Rev. A. 2012. V. 86. 013835. https://doi.org/10.1103/PHYSREVA.86.013835
36. *Kasparian J., Rodriguez M., Méjean G. et al.* // Science. 2003. V. 301. № 5629. P. 61. https://doi.org/10.1126/science.1085020
37. *Voronin A.A., Gordienko V.M., Platonenko V.T. et al.* // Opt. Lett. 2010. V. 35. P. 3640. https://doi.org/10.1364/OL.35.003640
38. *Mitrofanov A.V., Voronin A.A., Sidorov-Biryukov D.A. et al.* // Optica. 2016. V. 3. P. 299. https://doi.org/10.1364/OPTICA.3.000299
39. *Serebryannikov E.E., Panchenko V.Ya., Zheltikov A.M.* // Phys. Rev. A. 2017. V. 96. 033853. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.96.033853
40. *Voronin A.A., Mitrofanov A.V., Sidorov-Biryukov D.A. et al.* // J. Opt. 2018. V. 20. 025504. https://doi.org/10.1088/2040-8986/AA9BCC
41. *Reiter F., Graf U., Serebryannikov E.E. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 105. 243902. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.243902
42. *Mitrofanov A.V., Voronin A.A., Sidorov-Biryukov D.A. et al.* // Opt. Lett. 2016. V. 41. P. 3479. https://doi.org/10.1364/OL.41.003479
43. *Bespalov V.I., Talanov V.I.* // JETP Lett. 1966. V. 3. P. 471.
44. *Glek P.B., Voronin A.A., Panchenko V.Y., Zheltikov A.M.* // Laser Phys. Lett. 2020. V. 17. P. 055401. https://doi.org/10.1088/1612-202x/ab7827

EDN: EMCZBW
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 785–794

УДК 53.082.79

ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ РЕАКТОР ПИК. ПЕРВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

© 2022 г. М. В. Ковальчук[1], В. В. Воронин[2,*], С. В. Гаврилов[2], А. В. Гартвик[2], М. В. Дьячков[2], Д. А. Ипатов[2], В. А. Матвеев[2], В. В. Тарнавич[2], В. А. Ульянов[2]

[1] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия*

[2] *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра "Курчатовский институт", Гатчина, Россия*

*****E-mail: Voronin_VV@pnpi.nrcki.ru*

Поступила в редакцию 16.03.2022 г.
После доработки 31.03.2022 г.
Принята к публикации 31.03.2022 г.

Описаны параметры и состояние дел по созданию самого мощного источника нейтронов исследовательского реактора ПИК (НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ, Гатчина). Приведены результаты первых экспериментов на выведенных пучках нейтронов, проведенных на этапе вывода реактора ПИК на энергетический режим работы. Выведенный на проектные параметры научно-исследовательский реакторный комплекс ПИК на несколько десятилетий определит стратегию развития нейтронных исследований в Российской Федерации и станет основой Международного центра нейтронных исследований.

DOI: 10.31857/S0023476122050095

ВВЕДЕНИЕ

Реактор **ПИК** (пучковый исследовательский корпусной) (рис. 1) был задуман и спроектирован в начале 1970-х годов как источник нейтронных пучков самой высокой интенсивности. Удачная схема компоновки реактора, предложенная для реактора ПИК в 1966 г. [1], в дальнейшем стала использоваться практически во всех пучковых реакторах с тяжеловодным отражателем. Драматичная история создания реактора, изложенная в [2], продолжалась более 40 лет.

Рис. 1. Нейтронный исследовательский комплекс с реактором ПИК в Гатчине, Российская Федерация.

Ситуация начала меняться в 2010 г., когда по инициативе М.В. Ковальчука НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ включили в Программу совместной деятельности организаций, участвующих в составе Национального исследовательского центра "Курчатовский институт". В результате в 2011 г. был осуществлен физический пуск реактора на мощности 100 Вт, который подтвердил нейтронно-физические параметры реактора, полученные в ходе расчетов, а также экспериментально на критическом стенде "Физмодель реактора ПИК".

С июля 2013 г. НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ начал разрабатывать концепцию комплекса экспериментальных установок (станций) и его инженерной инфраструктуры. Была принята стратегия ввода реактора ПИК в эксплуатацию последовательными этапами увеличения мощности реактора и числа его технологических систем, а также увеличения исследовательских установок.

В 2018 г. проведено испытание систем реактора на мощности до 100 кВт – первого этапа Программы энергетического пуска.

В рамках проекта "Создание приборной базы реакторного комплекса ПИК" идет разработка экспериментальных каналов для новых установок, что позволит их смонтировать до набора элементами конструкции большой активности.

Все этапы освоения мощности, ввода новых систем и научного оборудования ведутся под постоянным государственным надзором регионального органа Ростехнадзора в рамках лицензии на эксплуатацию, выданной его центральным аппаратом.

В конце 2020 г. введены в эксплуатацию пять экспериментальных станций первой очереди для проведения экспериментов на выведенных пучках нейтронов.

В 2021 г. осуществлен переход реактора на энергетический режим работы этапа освоения мощности реактора до 10 МВт. В марте 2022 г. была достигнута мощность реактора 7 МВт, что подтвердило высокую квалификацию персонала и продемонстрировало устойчивую и надежную работу реактора и технологических систем.

Идет подготовка к переходу от пусковой активной зоны к эксплуатационному комплекту тепловыделяющих сборок, обеспечивающих удовлетворительную длительность цикла работы реактора порядка 25 сут между перегрузками топлива. Концепция нового топлива для реактора ПИК основана на использовании серийных тепловыделяющих элементов (**ТВЭЛ**) реактора СМ с повышенной загрузкой ^{235}U, применении выгорающего поглотителя и модернизации конструкции самой топливной кассеты. В настоящее время ведется подготовка к заключению контракта с предприятиями АО "ТВЭЛ" Госкорпорации "Росатом" на поставку первой партии нового топлива в 2023 г.

Параллельно с увеличением мощности реактора идет создание комплекса экспериментального оборудования для проведения научных экспериментов.

Наиболее эффективное использование источника нейтронного излучения возможно, если высокоэффективные пучки нейтронов, выводимые из высокопоточного реактора, доставляются без потерь к ультрасовременным экспериментальным установкам, позволяющим проводить самые передовые исследования во всех перечисленных выше областях. Поэтому обе составляющие, т.е. высокая производительность самого источника нейтронов и современный уровень приборной базы, имеют равное значение для успешной реализации научных программ Международного центра нейтронных исследований на реакторе ПИК. Таким образом, один из основных принципов общей концепции создания экспериментальных станций – совершенствование приборной базы – должен "идти рука об руку" с совершенствованием источника.

Работы по оснащению реактора ПИК комплексом современного оборудования осуществляются в рамках двух проектов: "Реконструкция лабораторного комплекса научно-исследовательского реакторного комплекса ПИК" (сроки выполнения 2017–2020 гг.), "Создание приборной базы реакторного комплекса ПИК" (сроки выполнения 2019–2024 гг.). В результате реализации этих проектов будет создан научно-исследовательский комплекс, оснащенный 25 нейтронными станциями, источником холодных нейтронов, источником горячих нейтронов и источником ультрахолодных нейтронов, что позволит удовлетворить запросы на нейтронные исследования как со стороны научно-технического комплекса России, так и со стороны значительной части европейских партнеров на долгие годы. Десять нейтроноводных систем позволяют транспортировать нейтроны к 17 экспериментальным установкам, расположенным в нейтроноводном зале в низкофоновых условиях. Всего в трех экспериментальных залах комплекса планируется обеспечить до 50 позиций на пучках, на которых одновременно могут вести эксперименты различные исследовательские группы. Подробное описание приборной программы реакторного комплекса ПИК изложено в [3].

ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕАКТОРА ПИК

Реактор ПИК представляет собой компактный нейтронный источник с объемом активной зоны ~50 л, окруженный тяжеловодным отражателем.

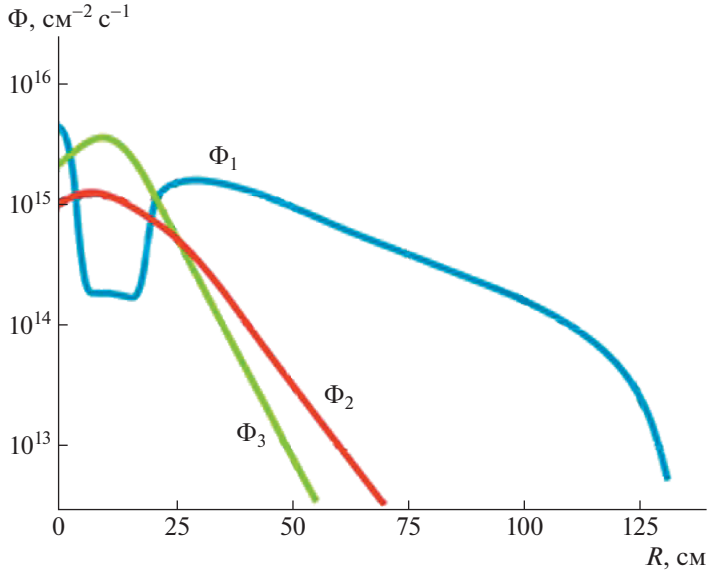


Рис. 2. Распределение нейтронных потоков: Ф1 – поток тепловых нейтронов, $E < 0.6$ кэВ; Ф2 – поток эпитепловых нейтронов, $0.6 < E < 5$ кэВ; Ф3 – поток быстрых нейтронов, $E > 5$ кэВ.

Максимальная невозмущенная плотность потока тепловых нейтронов достигает 5×10^{15} н/см^2·с в центральной водной полости и 1.2×10^{15} н/см^2·с в отражателе при тепловой мощности реактора 100 МВт (рис. 2). Активная зона размещается в корпусе реактора и охлаждается легкой водой под давлением 5 МПа. Корпус реактора, в свою очередь, помещен в бак отражателя, заполненный тяжелой водой. Подробно параметры реактора и его характеристики изложены в [2].

ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ РЕАКТОРА ПИК

Тепловая мощность – 100 МВт; усредненная по периметру ТВЭЛ плотность теплового потока достигает 10 МВт/м^2, что соответствует примерно 6 МВт на 1 л объема активной зоны в горячей точке; средняя по активной зоне нагрузка – 2 МВт/л. В качестве топлива использованы хорошо отработанные ТВЭЛ типа СМ с увеличенной до 500 мм высотой топлива.

Для вывода нейтронного излучения из отражателя реактора ПИК, а также облучения образцов реактор ПИК снабжен значительным числом экспериментальных каналов (рис. 3). Центральный экспериментальный канал (**ЦЭК**) размещен в водной полости активной зоны. Невозмущенная плотность потока тепловых нейтронов в полости – 5×10^{15} н/см^2·с; горизонтальные экспериментальные каналы (**ГЭК**) – девять штук; потоки тепловых нейтронов на выходе $(0.2–3) \times$ $\times 10^{11}$ н/см^2·с; диаметры – 100–250 мм; наклонные экспериментальные каналы (**НЭК**) – шесть штук; потоки тепловых нейтронов на выходе $(0.4–2) \times 10^{10}$ н/см^2·с; диаметры каналов – 90–140 мм; вертикальные экспериментальные каналы (**ВЭК**) – семь штук. Потоки тепловых нейтронов на донышках – $(1–3) \times 10^{14}$ н/см^2·с; диаметры каналов – 41–155 мм.

Если тепловые нейтроны ($T \sim 300$ K) образуются непосредственно в отражателе реактора, то получение нейтронов больших или меньших энергий требует использования специальных замедлителей, находящихся при определенной температуре. В реакторе ПИК предусмотрены два источника холодных нейтронов на каналах ГЭК-2 и ГЭК-3. В качестве замедлителя используется жидкий дейтерий при температуре $T = 20$ K, источник горячих нейтронов – на канале ГЭК-8. Замедлитель – графит при температуре $T = 1200–2000$ K. Транспортировка нейтронов к экспериментальным станциям в нейтроноводном зале осуществляется по специальным нейтроноводам в количестве 10 штук. Затем возможно ветвление для увеличения числа пучковых позиций, общая длина ~1200 м. Потоки нейтронов на выходе нейтроноводов $(0.1–1.3) \times 10^{10}$ н/см^2·с.

Таким образом, по отношению к существующим исследовательским реакторам ПИК предоставит уникальные возможности как для проведения более глубоких исследований с использованием нейтронов, так и для проведения новых исследований, недоступных в настоящее время на отечественных исследовательских реакторах. Несмотря на значительные сроки пуска реактора ПИК, он остается востребованным. Количество научных задач, решаемых с использованием нейтронных пучков, увеличивается с каждым годом.

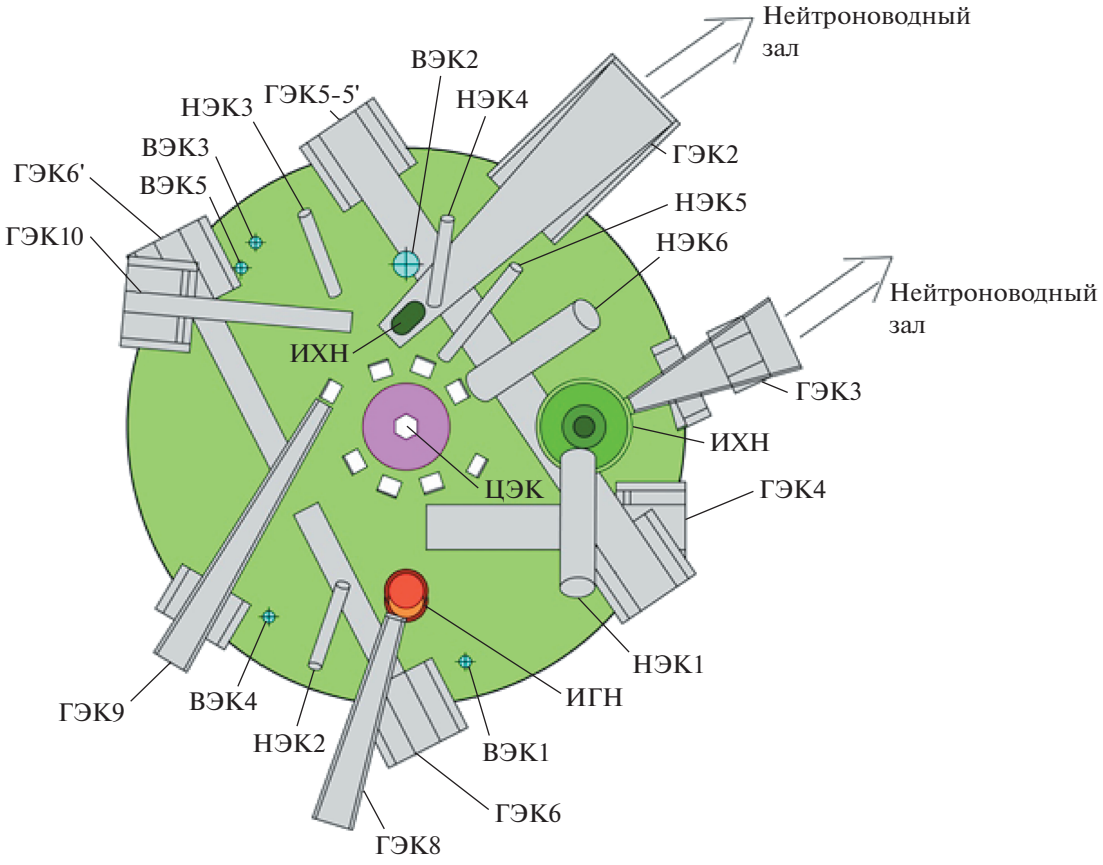


Рис. 3. Схема экспериментальных каналов реактора ПИК.

Совершенствуются приборы и возрастают требования к интенсивности нейтронных пучков.

По параметрам нейтронных пучков и экспериментальным возможностям реактор ПИК будет превосходить все действующие исследовательские реакторы.

ПЕРВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ НА ВЫВЕДЕННЫХ ПУЧКАХ НЕЙТРОНОВ

В декабре 2020 г. пять исследовательских станций реакторного комплекса ПИК были введены в эксплуатацию. К ним относятся:

– тестовый нейтронный рефлектометр (**ТНР**), предназначенный для испытаний нейтронных поляризующих и неполяризационных зеркал нейтроноводов и других нейтронно-оптических устройств, в том числе для прикладных задач самого реакторного комплекса;

– текстурный дифрактометр ТЕХ-3 для задач текстурной дифрактометрии, в том числе прикладных исследований текстуры конструкционных и технических материалов;

– дифрактометр поляризованных нейтронов (**ДПН**) для исследований особенностей магнитного упорядочения в кристаллических структурах;

– рефлектометр поляризованных нейтронов NERO-2 для исследований поверхностных структур, границ раздела, тонких пленок и многослойных структур как магнитных, так и немагнитных материалов;

– тестовый нейтронный спектрометр Т-Спектр для измерений времяпролетным методом нейтронного спектра на выходе экспериментальных каналов реактора и нейтроноводов.

Экспериментальные работы на станциях проводились на этапе перехода реактора на энергетический режим работы, предполагающий выход на тепловую мощность 10 МВт. К ним относится серия методических экспериментов, таких как измерение абсолютного нейтронного потока на горизонтальном экспериментальном канале № 10, изучение характеристик четырехмодового формирователя (поляризатора) нейтронного пучка на рефлектометре ТНР, изучение характеристик нейтронно-оптического формирователя (поляризатора) на рефлектометре NERO-2 и другие.

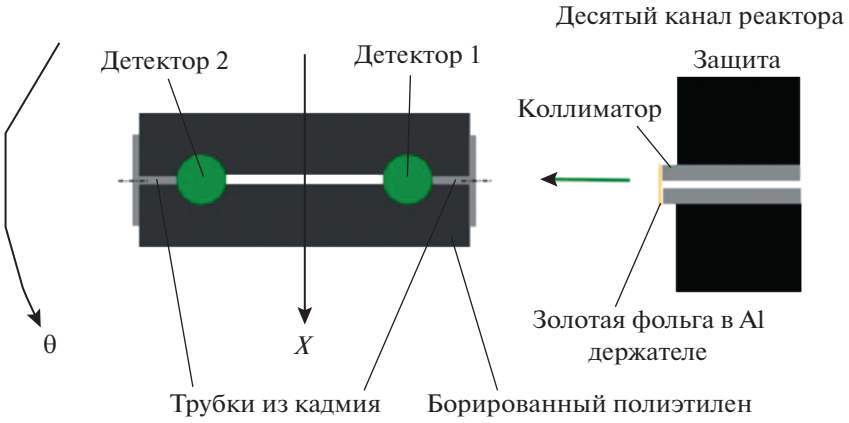


Рис. 4. Экспериментальная схема измерения абсолютного потока на канале ГЭК-10.

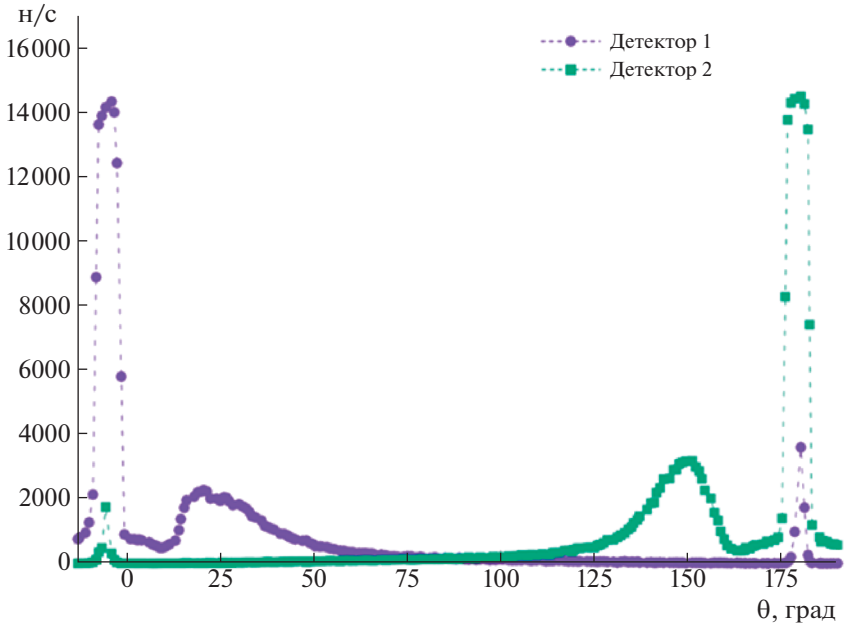


Рис. 5. Азимутальное сканирование по углу θ.

Измерение абсолютного нейтронного потока проводили двумя независимыми методами, включающими в себя измерение плотности нейтронного пучка методом активации золотых фольг и с помощью пропорциональных счетчиков. Экспериментальная схема представлена на рис. 4.

Конструкция располагалась в защите монохроматора установки ТЕХ-3 [4] и представляла собой два детектора в виде пропорциональных счетчиков, помещенных в борированный полиэтилен. Между детекторами в полиэтилене для прохождения пучка на второй детектор размещался канал диаметром 5 мм. Нейтронный пучок формируется коллиматором, расположенным в разборной защите реактора. Вся конструкция располагалась на столике перемещения с возможностью азимутального вращения (угол θ).

На рис. 5 представлены результаты азимутального сканирования по углу θ вокруг оси ортогональной плоскости рис. 4. Два максимума интенсивности, регистрируемой детекторами 1 и 2, соответствуют двум рабочим позициям, на которых проводили основные измерения (“позиция 1” и “позиция 2”).

Таким образом, в результате проведенных экспериментов двумя независимыми методами впервые был измерен поток тепловых нейтронов на выходе ГЭК-10 реактора ПИК. Поток составил $\sim 10^6$ н/с/см^2 при мощности реактора 100 кВт, что совпало с теоретической оценкой. Результаты измерений представлены в табл. 1.

Таблица 1. Измеренные значения

Позиция	Детектор 1, н/с	Детектор 2, н/с	Детектор 1, н/с/см^2	Детектор 2, н/с/см^2	На фольге, н/с/см^2
1	12447.27	887.76	8.29×10^5	0.59×10^5	1.3×10^6
2	871.01	12735.79	0.58×10^5	8.48×10^5	

На рис. 6 представлено фото рефлектометра поляризованных нейтронов NERO-2. Результаты нейтронно-физических испытаний на станции “рефлектометр поляризованных нейтронов NERO-2” включали, в том числе, настройку созданного нейтронно-оптического формирователя. Результаты первых измерений, проведенных на NERO-2, доложены на конференции РНИКС-2021 [4]. Нейтронно-оптический формирователь был предварительно отъюстирован с помощью лазерного источника. Далее было проведено сканирование положения формирователя поперек оси нейтронного пучка с целью определения координат каналов (рис. 7).

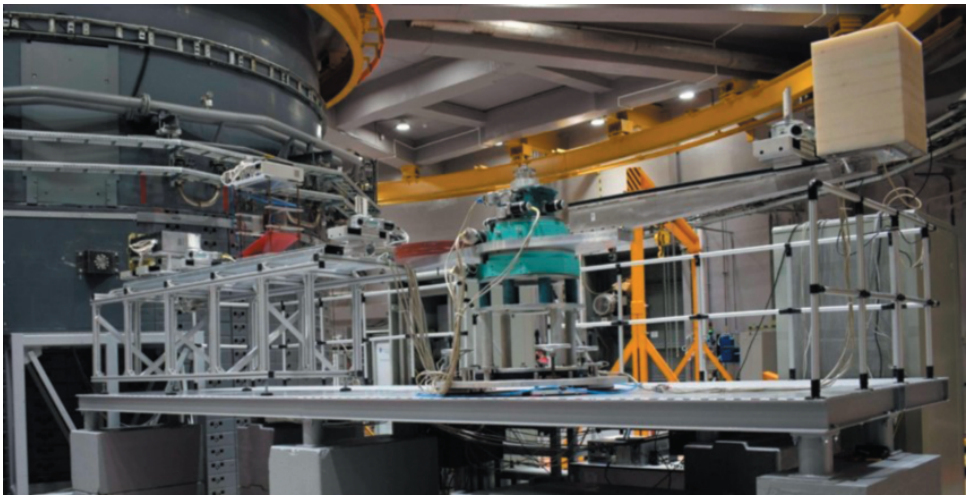


Рис. 6. Рефлектометр поляризованных нейтронов NERO-2.

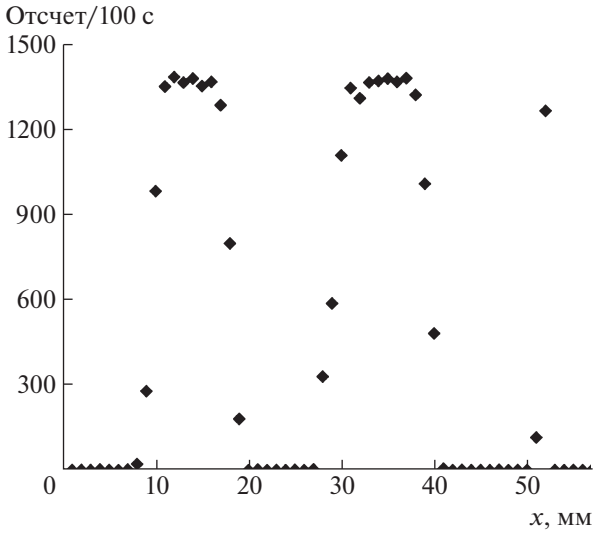


Рис. 7. Зависимость интенсивности нейтронного излучения, регистрируемой детектором, от положения нейтронно-оптического формирователя.

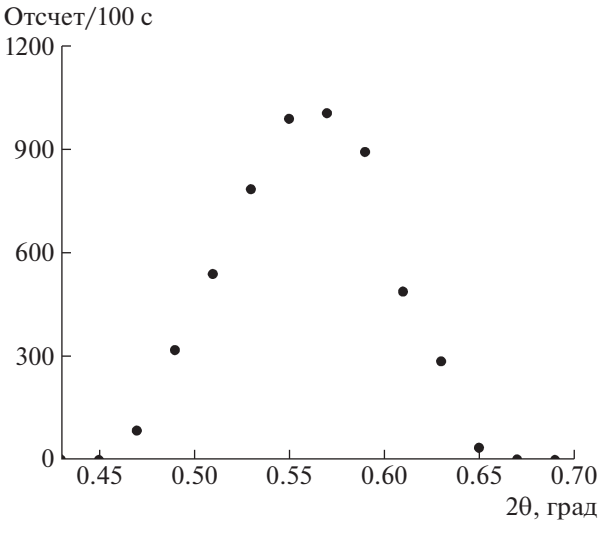


Рис. 8. Угловой профиль нейтронного пучка, отражаемый от суперзеркала Ni/Ti ($m = 2$), неполяризующего канала формирователя.

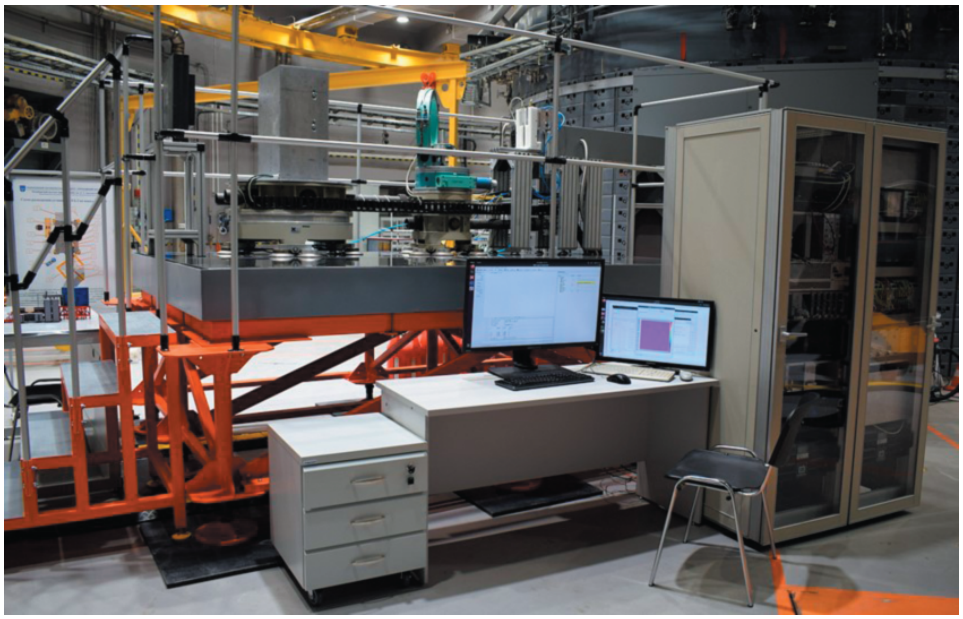


Рис. 9. Текстурный дифрактометр ТЕХ-3.

По результатам сканирования, представленным на рис. 7, определены границы каналов:

– технологический (юстировочный) канал без оптики: $x = 52$ мм, ширина 1 мм;

– поляризующий канал (суперзеркало FeCo/TiZr, $m = 2$): $x = 29–39$ мм, ширина 10 мм;

– неполяризующий канал (суперзеркало Ni/Ti, $m = 2$): $x = 8–18$ мм, ширина 10 мм.

Путем сканирования положения формирователя поперек оси нейтронного пучка и качания вокруг вертикальной оси была определена рабочая позиция суперзеркала неполяризующего канала. На рис. 8 приведен профиль углового распределения интенсивности нейтронов, отражаемых от суперзеркала Ni/Ti ($m = 2$) неполяризующего канала формирователя рефлектометра.

На рис. 9 показан текстурный дифрактометр ТЕХ-3. Общее описание ТЕХ-3 представлено в [5].

На дифрактометре ТЕХ-3 была проведена модернизация по установке энкодеров на привод механизмов поворота узла детектора относительно узла образца, что позволило контролировать перемещения и работоспособности системы питания воздухом пневмоопор. Проведена серия измерений, в том числе изучение зависимости интенсивности нейтронного пучка от углового расположения монохроматора вокруг вертикальной оси (при мощности 400 кВт), изучение зависимости интенсивности нейтронного пучка от поперечного смещения детектора относительно максимума, при мощностях 400 и 800 кВт (рис. 10).

Тестовый нейтронный рефлектометр размещен на канале ГЭК-9. Нейтронный спектр выходного пучка, отфильтрованный от быстрых нейтронов суперзеркалом, был предварительно измерен времяпролетным методом [6]. Далее на ТНР последовательно проводилась юстировка основных оптических устройств. Результаты были доложены на конференции РНИКС-2021 [7]. В частности, была проведена юстировка по нейтронному пучку одного из основных узлов, а именно четырехмодового формирователя (поля-

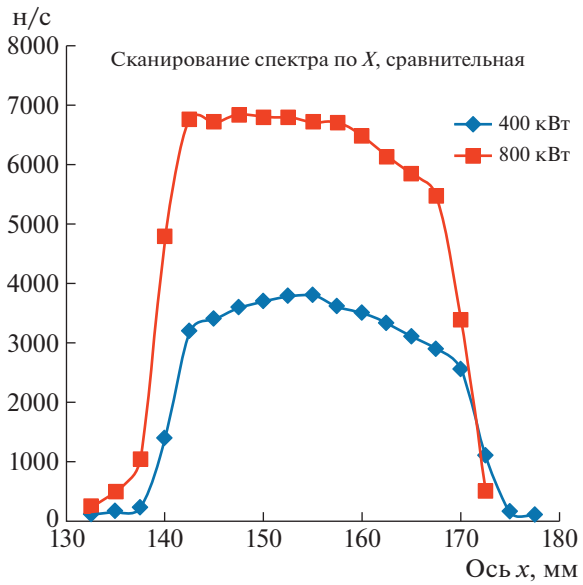


Рис. 10. Зависимость интенсивности детектора от поперечного смещения относительно максимума на мощностях 400–800 кВт (диафрагма 30 × 30 мм).

Рис. 11. Тестовый нейтронный рефлектометр.

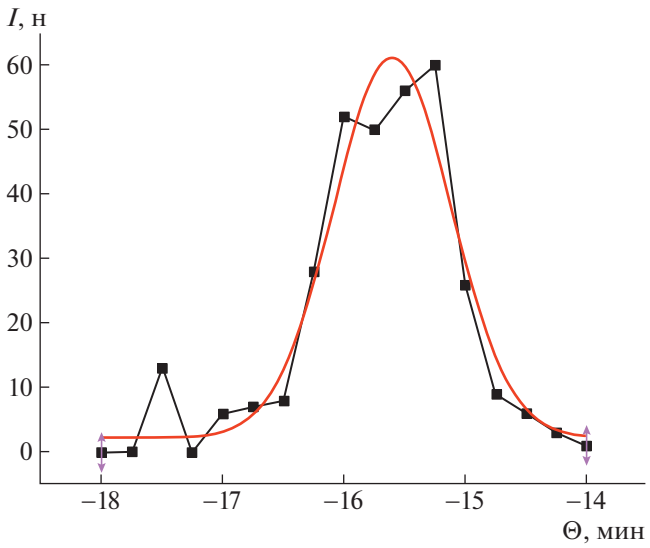


Рис. 12. Профиль пучка, отраженного от зеркала 2 четырехмодового формирователя (монохроматический неполяризующий канал). Профиль пучка получен сканированием детектора с тонкой диафрагмой 0.2 мм.

ризатора) с целью проверки его характеристик. Для точной юстировки каналов перед формирователем была установлена диафрагма шириной 0.5 мм. Изображение самой установки представлено на рис. 11.

Формирователь устанавливали так, чтобы пучок в неполяризующей монохроматической моде однократно отражался от зеркала. После оптимизации координаты положения формирователя при перемещении поперек пучка с использованием тонкой диафрагмы (0.2 мм) при мощности 60 кВт на детекторе был снят профиль пучка, отраженного от зеркального монохроматора NiMo/Ti (рис. 12).

Времяпролетный спектр прямого пучка третьей и второй мод формирователя был снят на мощностях ~400 и 800 кВт соответственно (рис. 13).

На рис. 14 представлен тестовый спектрометр Т-Спектр. При калибровке спектрометра по времени пролета нейтронов получены времяпролетные спектры канала ГЭК-3 сквозь кадмиевый (ядерный, преимущественно поглощающий) и бериллиевый (поликристаллический, преимущественно рассеивающий) нейтронные фильтры. Измерения проводили на некалиброванной мощ-

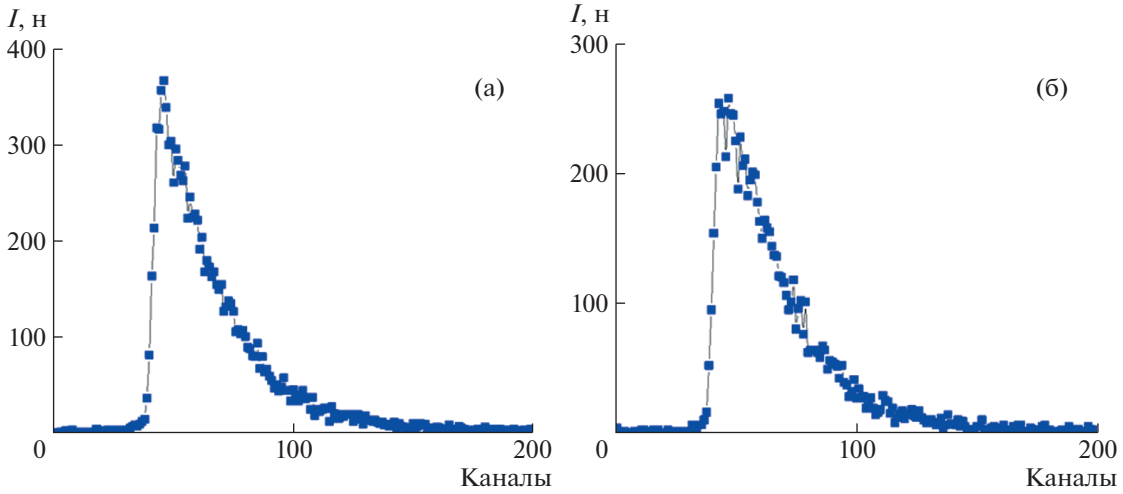


Рис. 13. Спектр второй (а) моды (белый неполяризующий канал) формирователя и третьей (б) моды (белый поляризующий канал).

Рис. 14. Тестовый спектрометр Т-Спектр.

ности реактора 85 кВт с оценкой по одному каналу. В качестве примера представлены результаты калибровки по бериллиевому фильтру, рис. 15. Полученные результаты говорят о полной работоспособности аппаратного обеспечения инструмента.

ВЫВОДЫ

В настоящее время проводится плановый и поэтапный вывод реактора ПИК на проектную мощность 100 МВт, параллельно с этим идет создание комплекса экспериментального оборудования для проведения исследований на выведенных пучках нейтронов, которое должно завершиться к концу 2024 г. Результаты первых экспериментов, проведенных на этапе выхода реактора на энергетический режим работы, совпадают с теоретическими ожиданиями и подтверждают проектные параметры реактора ПИК.

Авторы выражают благодарность службам эксплуатации реактора ПИК, которые обеспечили проведение исследований, а также сотрудникам НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ, принявшим участие в работах и подготовке публика-

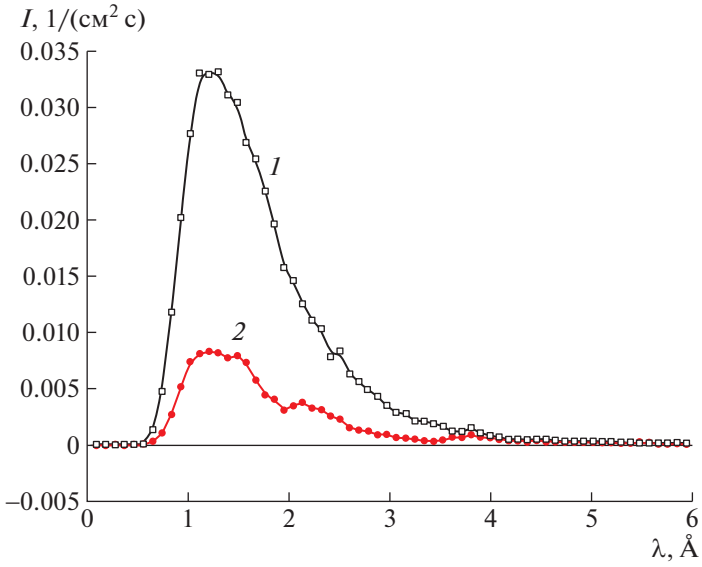


Рис. 15. Спектры открытого пучка (*1*) и пучка, прошедшего сквозь поликристаллический Be-фильтр толщиной 3.7 г/см^2 (*2*) в линейном масштабе.

ции, В.Г. Сыромятникову, К.А. Пшеничному, А.О. Полюшкину, М.Р. Колхидашвили.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ерыкалов А.Н., Каминкер Д.М., Коноплев К.А. и др.* // Физика ядерных реакторов. Обнинск: Изд-во ФЭИ, 1966. Т. III. С. 273.
2. *Ковальчук М.В., Смольский С.Л., Коноплев К.А.* // Кристаллография. 2021. Т. 66. № 2. С. 183. https://doi.org/10.31857/S0023476121020053
3. *Ковальчук М.В., Воронин В.В., Григорьев С.В., Серебров А.П.* // Кристаллография. 2021. Т. 66. № 2. С. 191. https://doi.org/10.31857/S0023476121020065
4. *Didenko G.P., Ipatov D.A., Kovalenko N.A. et al.* // J. Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2020. V. 14. P. S144 .
5. *Матвеев В.А., Плешанов Н.К., Головастов Д.С., Сизов А.В.* // Тез. докл. конф. по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021). 2021. С. 250.
6. *Ulyanov V.A., Tarnavich V.V., Syromyatnikov V.G. et al.* // Eur. Conf. On Neutron Scatt., St. Petersburg, Russia. Abstract Book. 2019. P. 321.
7. *Дьячков М.В., Ульянов В.А., Сыромятников В.Г. и др.* // Тез. докл. конф. по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021). 2021. С. 244.

EDN: XCGJYE
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 795–800

УДК 621.384

ИМПУЛЬСНЫЙ НЕЙТРОННЫЙ ИСТОЧНИК НА ОСНОВЕ ИСПАРИТЕЛЬНО-СКАЛЫВАЮЩЕЙ РЕАКЦИИ НА БАЗЕ ПРОТОННОГО СИНХРОТРОНА У-1.5

© 2022 г. М. В. Ковальчук[1], Н. Е. Тюрин[1], С. В. Иванов[1,*], А. П. Солдатов[1]

[1] *Институт физики высоких энергий им. А.А. Логунова НИЦ "Курчатовский институт", Протвино, Россия*

*****E-mail: sergey.ivanov@ihep.ru*

Поступила в редакцию 17.03.2022 г.
После доработки 15.04.2022 г.
Принята к публикации 19.04.2022 г.

Представлен проект импульсного нейтронного источника на основе испарительно-скалывающей реакции и протонного пучка, ускоренного до энергии 1.32 ГэВ в действующем быстроцикличном протонном синхротроне У-1.5 НИЦ КИ – ИФВЭ. Проект позволит в короткое время с минимальными затратами расширить возможности для проведения прикладных исследований на пучке У-1.5 – установке (длина орбиты 99.16 м), также используемой как кольцевой инжектор (бустер) для большого протонного синхротрона У-70 (1.487 км). Источник будет ориентирован на приоритетное применение времяпролетных нейтронно-физических методик.

DOI: 10.31857/S0023476122050101

ВВЕДЕНИЕ

Современные тенденции в развитии науки, техники и технологии во многом связаны с прогрессом в исследованиях кристаллических и аморфных материалов естественного и искусственного происхождения. Успех в решающей степени зависит от наличия методов, способных исследовать структуру и свойства веществ, материалов и изделий в различных пространственных и временных масштабах. Использование пучков нейтронов – один из основных методов таких исследований, комплементарный к методам на основе синхротронного излучения. Для получения высокоинтенсивных потоков нейтронов используются:

– реакции деления (исследовательские, реже промышленные ядерные реакторы);

– ядерные реакции, инициированные пучками ускоренных заряженных частиц.

Основная доля подобных исследований в мире проводится на ядерных реакторах. Большая часть этих реакторов была сооружена в 1960–1970 гг. Регламентный срок службы этих установок (реакторов) истек или истекает в ближайшее десятилетие. Ввод в эксплуатацию новых исследовательских установок, основанных на реакторной технологии получения нейтронных потоков, в настоящее время событие редкое, а в будущем – маловероятное в связи с экологическим движением за сохранение окружающей среды.

Дальнейшие исследования с использованием нейтронов в значительной степени связываются с установками, основанными на протонных ускорителях. При этом по плотности потоков нейтронов такие источники при мегаваттной мощности пучка и энергии протонов 1–1.5 ГэВ зачастую превосходят исследовательские ядерные реакторы. Отметим, что эксплуатация и вывод (снятие) из эксплуатации нейтронных установок на основе ускорительных технологий – существенно более простая задача, чем для установок на ядерных реакторах.

ЦЕЛЬ ПРОЕКТА

Целью проекта является создание импульсного нейтронного источника (**ИНИ**) на основе реакций испарительно-скалывающего типа (*spallation*), генерируемых пучком протонов со средней мощностью до 3 кВт в результате его взаимодействия с протяженными плотными мишенями. Установка создается на базе действующего ускорительного комплекса У-70 НИЦ КИ – ИФВЭ (Протвино, Московская область) и предназначена для проведения исследований свойств веществ, материалов и изделий в нано- и субнанометровом диапазоне, а также для исследований в области ядерной физики. Установка будет ориентирована на приоритетное применение времяпролетных нейтронно-физических методик.

Успешная реализация проекта позволит уменьшить имеющийся дефицит исследовательских нейтронных источников в России и мире. Будет создана научно-техническая база для практической подготовки исследовательских и инже-

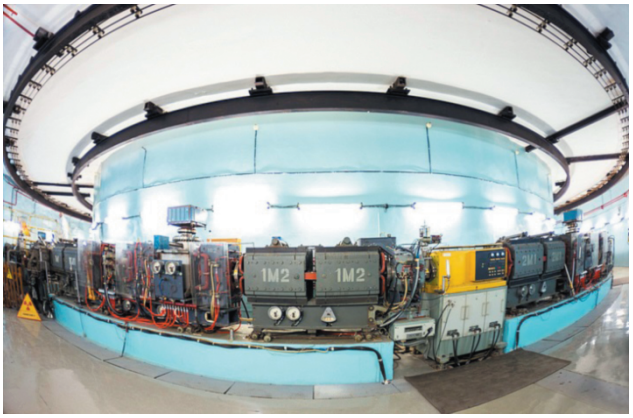


Рис. 1. Протонный синхротрон У-1.5.

нерных кадров в области нейтронных методов исследований.

Можно утверждать, что создаваемая установка является прототипом импульсного источника нейтронов (предложение 2010 г., НИЦ КИ – ИФВЭ, проект ОМЕГА), рассчитанного на работу с пучками протонов мегаваттной мощности [1]. Именно по этой причине для предложенной установки используются названия “ИНИ ОМЕГА” или “прототип ИНИ ОМЕГА”.

ТЕХНИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ

Проект опирается на успешный отечественный и мировой опыт создания и эксплуатации испарительных источников нейтронов, также основанных на кольцевых резонансных ускорителях протонов. К их числу относится нейтронный источник ГНЕЙС (синхроциклотрон 1 ГэВ; ПИЯФ, Россия) [2]. Зарубежными аналогами с заметно большей мощностью драйверного пучка являются источники SINQ (изохронный циклотрон 590 МэВ; PSI, Швейцария) [3], ISIS (синхротрон 0.8 ГэВ; RAL, Великобритания) [4], J-PARC (синхротрон 3 ГэВ, JAEA/KEK, Япония) [5].

Таблица 1. Параметры протонного синхротрона У-1.5

Параметр	Значение
Энергия инжекции, МэВ	30
Энергия ускоренного пучка, ГэВ	1.32
Длина орбиты, м	99.16
Интенсивность пучка, протонов/сгусток	$(1–4) \times 10^{11}$
Пакетно-импульсный режим	
– число импульсов (сгустков) пучка в пакете	1–29
– период следования импульсов внутри пакета, мс	60
– частота следования импульсов внутри пакета, Гц	$50/3 = 16_{2/3}$
– период следования пакетов сгустков, с	8–10
Длительность импульса (сгустка), нс	80–100

Проект предусматривает создание исследовательского ИНИ ОМЕГА на основе реакций испарительно-скалывающего типа, генерируемых пучком протонов с энергией 1.3–1.5 ГэВ и мощностью до 3 кВт. Ожидается достижение высокого показателя “результат/затраты” и короткого срока реализации с уменьшенными техническими рисками. Этому есть две предпосылки.

С одной стороны, будут использованы профильные компетенции и инженерная инфраструктура НИЦ КИ – ИФВЭ в области создания и эксплуатации протонных ускорителей, каналов транспортировки и формирования выведенных пучков заряженных частиц, экспериментальных физических установок с фиксированными внешними мишенями и сопровождающих разделов радиационной физики и техники.

С другой стороны, в высокой степени готовности к работе в составе ИНИ находится его наиболее сложный и дорогостоящий компонент – интенсивный ускоритель заряженных частиц (протонов). В действующем Ускорительном комплексе У-70 давно и успешно эксплуатируется протонный синхротрон У-1.5 (рис. 1), являющийся кольцевым инжектором (бустером) для большого протонного синхротрона У-70. ИНИ ОМЕГА будет размещен вблизи У-1.5 в помещении № 3Н на нижнем этаже комплекса зданий “Бустер” (рис. 2). Технические параметры синхротрона У-1.5 в его нынешнем состоянии, актуальные для создания ИНИ, приведены в табл. 1. На основе этой таблицы можно сделать следующие заключения.

В-первых, энергия протонного пучка У-1.5, равная 1.32 ГэВ, находится вблизи пологого максимума (равного примерно 25) удельного выхода “нейтрон/протон/ГэВ” для протяженной плотной мишени [6]. Именно по этой причине энергии драйверных пучков ИНИ на основе протонных синхротронов, действующих в мире, приходятся на диапазон от 0.8 ГэВ (ISIS, Великобритания) до 3.0 ГэВ (J-PARC, Япония).

Во-вторых, временная (пакетно-импульсная) структура пучка У-1.5, продиктованная условиями инжекции от 1 до 29 сгустков в кольцо У-70, также удачно подходит к требованиям ИНИ с короткими импульсами драйверного протонного пучка. Действительно, длительность одного импульса (сгустка) пучка из У-1.5 не превышает 0.1 мкс. Это заметно меньше характерного времени замедления нейтронов в легком замедлителе, не превышающего 5–10 мкс (зависит от размеров и конструкции мишени). Поэтому форма нейтронных импульсов будет слабо зависеть от формы сгустков драйверного протонного пучка. В то

Рис. 2. Комплекс зданий “Бустер”.

же время периодичность следования протонных сгустков из У-1.5, равная 60 мс (частота следования 50/3 Гц), благоприятна для использования нейтронно-физических времяпролетных методик. В упоминавшихся выше действующих ИНИ частоты следования импульсов сопоставимы: 50 Гц (ISIS) и 25 Гц (J-PARC).

В-третьих, по техническим причинам сложно ожидать, что достижимая интенсивность пучка в У-1.5 (с учетом его модернизации) превысит $1 \times \times 10^{12}$ протонов/сгусток. Поэтому средняя мощность пучка на нейтронгенерирующей мишени не превысит 1–2 кВт. С одной стороны, это радикально упрощает ее конструкцию, что привлекательно для использования имеющихся зданий и сооружений комплекса “Бустер” (рис. 2). С другой стороны, ИНИ ОМЕГА не сможет генерировать рекордно большие потоки нейтронов. Это неизбежно ограничивает область его применения до аналитических нейтронно-физических исследований не очень плотных объектов и исследований в области ядерной физики. Исследования по экстремальному радиационному материаловедению оказываются недоступными.

ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОЕКТА

Проектом предусмотрены модернизация и техническое перевооружение основных технологических систем действующего протонного синхротрона У-1.5 и его инжектора – линейного ускорителя протонов Урал-30 (рис. 3) с целью повышения интенсивности протонного пучка. Перечень создаваемых и модернизируемых объектов следующий:

– источник отрицательных ионов водорода (H^-) для перехода к схеме перезарядной инжекции в У-1.5, позволяющей кратно поднять его интенсивность;

– ключевые технологические системы линейного ускорителя Урал-30, такие как модулятор системы ВЧ-питания, система регулирования ВЧ-мощности для компенсации эффекта нагрузки ускоряющих резонаторов током пучка, системы диагностики пучка протонов и ионов H^-;

– ключевые технологические системы протонного синхротрона У-1.5, такие как прямолинейный участок с перезарядной мишенью для ввода пучка H^-, оборудование ускоряющих ВЧ-станций, системы коррекции магнитного поля и диагностики параметров пучка, импульсные и ударные магниты;

– новый канал транспортировки пучка протонов, выведенных из У-1.5, к нейтронгенерирующей мишени;

Рис. 3. Линейный ускоритель Урал-30.

Таблица 2. Основные характеристики драйверного протонного пучка

Параметр	Значение
Энергия ускоренных протонов, ГэВ	1.32–1.50
Число протонов в импульсе (сгустке)	10^{12}
Частота следования импульсов внутри пакета, Гц	$50/3 = 16_{2/3}$
Количество импульсов в пакете	29
Период следования пакетов, с	6.5
Длительность импульса (сгустка) (ширина на полувысоте), нс	50
Мощность пучка (средняя), кВт	1.2
Выход нейтронов, нейтронов/протон	33
Интенсивность нейтронов на свинцовой (вольфрамовой) мишени, нейтронов/с	1.5×10^{14}

Таблица 3. Перечень основных составляющих ИНИ

Обозначение	Название системы
A	Источник отрицательных ионов водорода H^-
B	Линейный ускоритель Урал-30
C	Канал перевода инжектируемого пучка в синхротрон У-1.5
D	Протонный синхротрон (бустер) У-1.5
E	Канал транспортировки драйверного пучка протонов к мишени
F	Нейтронгенерирующая мишенная станция
G	Каналы транспортировки нейтронов и экспериментальные станции

– нейтронгенерирующая мишенная станция, нейтронные каналы с экспериментальными станциями.

В табл. 2 приведены параметры протонного пучка У-1.5 как драйверного пучка для ИНИ ОМЕГА после проведения комплекса перечисленных мероприятий.

Возможность повышения энергии пучка с 1.32 до 1.50 ГэВ и уменьшения периода следования пакетов с 8–10 до 6.5 с (сравните табл. 1 и табл. 2) будет обеспечена новой системой питания кольцевого электромагнита У-1.5, введенной в эксплуатацию в 2021 г.

Оценки показывают, что для драйверного пучка с параметрами из табл. 2 на доступных в комплексе зданий “Бустер” (рис. 2) пролетных базах масштаба 20 м исследования по методу времени пролета нейтронов могут проводиться в широком диапазоне энергий нейтронов от тепловых (≥0.01 эВ) до промежуточных (≤1 кэВ).

Схема планировки ИНИ ОМЕГА показана на рис. 4. буквенные обозначения основных составляющих, используемые на этом рисунке, сведены в табл. 3.

КАНАЛ ТРАНСПОРТИРОВКИ

Канал транспортировки выведенного из синхротрона У-1.5 протонного пучка в помещении № 3Н комплекса зданий “Бустер” включает в себя начальную часть существующего канала перевода пучка из У-1.5 в У-70 и вновь создаваемый участок в виде ответвления от канала перевода.

В состав канала транспортировки входят пять дипольных магнитов (*D*) и шесть квадрупольных линз (*Q*). Суммарный угол поворота пучка 55.5°. Угол между направлением протонного пучка перед мишенью и продольной осью помещения № 3Н равен 15°. Длина новой части канала – 33 м.

Предварительные расчеты показывают, что полный размер транспортируемого по каналу протонного пучка с геометрическим эмиттансом 25π мм·мрад в горизонтальной и 14π мм·мрад в вертикальной плоскости не будет превышать половину апертуры магнитооптических элементов в обеих поперечных плоскостях. Линейная и угловая дисперсии полностью скомпенсированы. Диаметр круглого пучка, сформированного на входном торце мишени, составляет 22 мм.

МИШЕННАЯ СТАНЦИЯ И ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ КАНАЛЫ

Схема размещения мишенной станции с каналом транспортировки пучка протонов в помещении № 3Н приведена на рис. 5. Мишенный узел закрыт блоками бетонной и стальной радиационной защиты. Из него выходят шесть нейтронных каналов, расположенных с шагом 15° и пронумерованных против хода часовой стрелки цифрами *1–6* на рис. 4. Канал 2 параллелен оси помещения № 3Н.

Центральная часть мишенного узла со снятой радиационной защитой показана на рис. 6. Цифрами обозначены: *1* – водоохлаждаемый герметичный контейнер с вольфрамовой мишенью длиной 0.25 м, *2* – магистраль замкнутой циркуляции обессоленной охлаждающей воды, *3* – шесть слоев отражателя размером $0.1 \times 0.6 \times 0.6$ м^3 каждый, *4* – водный замедлитель, *5* – внешний корпус извлекаемого мишенного узла.

На первом этапе реализации проекта планируется создать три экспериментальные станции из шести возможных. Предварительно это:

– нейтронный времяпролетный рефлектометр общего назначения;

– дифрактометр общего назначения;

– стенд для нейтронно-активационного анализа.

Состав и назначение этих или иных экспериментальных установок будут определены на сле-

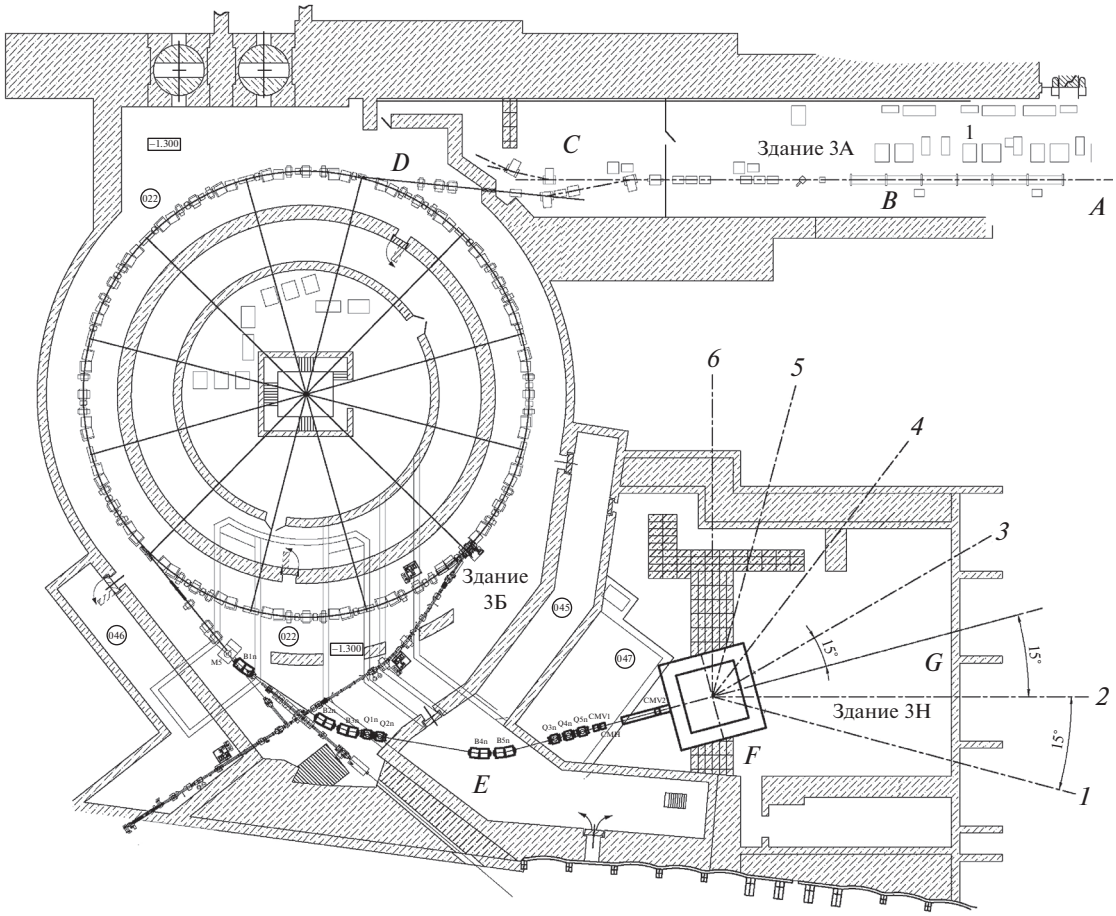


Рис. 4. Схема планировки ИНИ ОМЕГА.

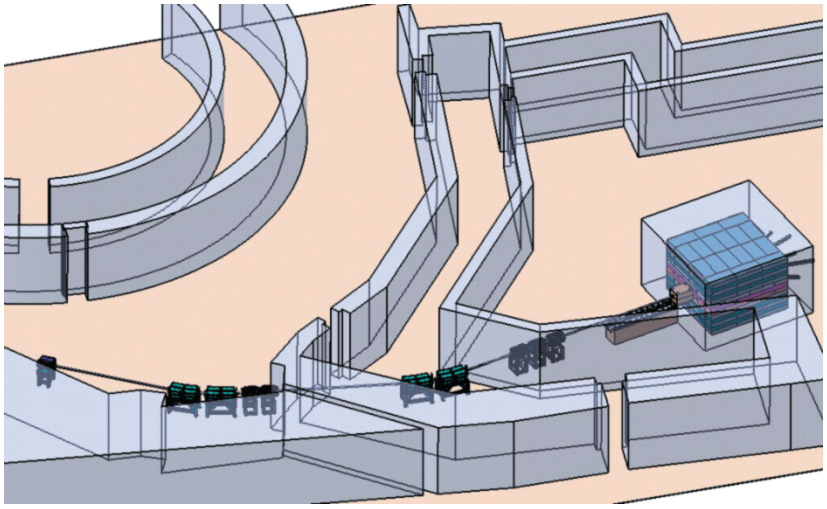


Рис. 5. Схема размещения мишенной станции.

дующих этапах проектирования по результатам обсуждения с научными организациями России, заинтересованными в проведении исследований на ИНИ ОМЕГА в режиме центра коллективного пользования (**ЦКП**).

В установке также предусмотрена возможность создания в будущем облучательного стенда, предназначенного для исследований радиационной стойкости элементной базы электроники или сечений образования целевых радионуклидов в

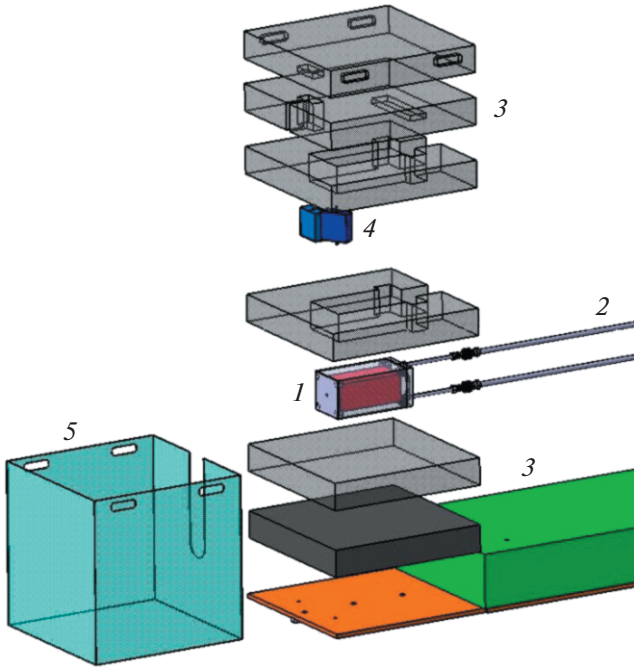


Рис. 6. Центральная часть мишенного узла.

полях как нейтронного, так и протонного излучений (прямое направление по ходу драйверного протонного пучка, рис. 4).

ОЦЕНКА ЭФФЕКТОВ ОТ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОЕКТА

Проект предлагает создание импульсного нейтронного источника на основе ускорителя заряженных частиц (протонов) как альтернативу источникам нейтронов на базе исследовательских ядерных реакторов малой и средней мощности. У многих из них подходит к концу регламентный срок эксплуатации. В постчернобыльский период сооружение новых исследовательских реакторных установок сопряжено с заметным противодействием экологически ориентированной общественности.

Проект призван ослабить дефицит исследовательских источников нейтронов в России и мире, заметный в настоящее время, и учитывает востребованность нейтронно-физических методов исследования в различных областях современной науки, техники и технологии, в том числе оборонных.

Объект явится существенной составляющей национальной научно-технической базы – сети нейтронных источников для консолидации исследовательского сообщества в практической работе с нейтронными инструментами, в том числе в целях отработки и освоения актуальных нейтронно-физических методик, образования и подготовки исследовательских и инженерных кадров для иных (флагманских) установок.

Проект ориентирован на создание мультидисциплинарного ЦКП для сторонних организаций для проведения экспериментальных исследований с помощью импульсных нейтронных потоков.

По размерам и топологии организации экспериментального зала и размещению станций проект позволяет, в отличие от нейтронных источников “mega-science” (где насчитывается от 20 до 50 станций, жестко ориентированных под конкретную методику исследований), оперативно перенастраивать каналы в интересах отдельных групп исследователей. Это достигается созданием нейтронгенерирующей мишенной станции с возможностью оптимизации замедлителей и отражателей в интересах конкретной экспериментальной станции для увеличения светосилы нейтронного потока на образце. Кроме того, параметры ускорителя заряженных частиц дают возможность оперативного изменения характеристик первичного (драйверного) пучка протонов (энергия, интенсивность, частота следования циклов сброса и др.).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Реализация проекта ИНИ ОМЕГА создаст (с минимальными техническими рисками, ресурсными и временными затратами) уникальную научную установку для скорейшего начала исследований с помощью импульсных потоков не реакторных (*spallation*) нейтронов.

Характеристики нейтронных пучков ИНИ ОМЕГА оптимально подходят для генерации коротких импульсов нейтронов для использования нейтронно-физических времяпролетных методик.

Реализация проекта ИНИ ОМЕГА расширит возможности применения ускорительного комплекса У-70 – крупнейшего в России действующего ускорителя заряженных частиц – для иных актуальных фундаментальных и прикладных исследований с использованием интенсивных пучков первичных и вторичных частиц высоких энергий.

Авторы выражают благодарность сотрудникам НИЦ КИ – ИФВЭ В.И. Гаркуше, А.М. Зайцеву, М.А. Маслову, В.Н. Пелешко и В.Ю. Ферапонтову за помощь в научно-техническом анализе и подготовке материалов статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. http://www.ihep.ru/files/IHEP-2-10.pdf
2. *Щербаков О.А., Воробьев А.С., Иванов Е.М.* // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2018. Т. 49. Вып. 1. С. 137.
3. *Wagner W., Dai Y., Glasbrenner H. et al.* // NIM A. 2006. V. 562. P. 541.
4. *Findlay D.J.S., Adams D.J., Broome T.A. et al.* // Proc. 10th EPAC, Edinburgh, Scotland. June 26–30, 2006. P. 935.
5. *Kobayashi H.* // Proc. 10th EPAC, Edinburgh, Scotland. June 26–30, 2006. P. 930.
6. *Стависский Ю.А.* // Успехи физ. наук. 2006. Т. 176. № 12. С. 1283.

EDN: ULBSGY
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 801–817

УДК 616-71/-78

РАСПРЕДЕЛЕННЫЙ ЦЕНТР ЯДЕРНОЙ МЕДИЦИНЫ НИЦ “КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ”: ИСТОРИЯ, СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ

© 2022 г. М. В. Ковальчук[1], О. С. Нарайкин[1], К. А. Сергунова[1], Ю. А. Дьякова[1], А. Н. Черных[1,*], Р. А. Алиев[1], В. И. Максимов[2], С. В. Иванов[3], Н. Е. Тюрин[3], А. П. Солдатов[3], Г. И. Кленов[1], В. С. Хорошков[1]

[1]Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

[2] Петербургский институт ядерной физики Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, Гатчина, Россия

[3] Институт физики высоких энергий Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, Протвино, Россия

*****E-mail: Chernykh_AN@nrcki.ru*

Поступила в редакцию 18.04.2022 г.
После доработки 18.04.2022 г.
Принята к публикации 21.04.2022 г.

Высокотехнологичное оборудование на основе ядерно-физических методов является неотъемлемой частью современной онкологической службы. Комплексный подход к развитию ядерной медицины и лучевой терапии в российской системе здравоохранения позволит не только увеличить доступность ядерных и ускорительных технологий для нашей страны, но и повысить их эффективность и безопасность. Настоящий обзор посвящен роли НИЦ “Курчатовский институт” в развитии ядерно-физических методов, применяемых в медицине, а также новым возможностям и перспективам, открывающимся в результате создания Научно-образовательного медицинского центра ядерной медицины НИЦ “Курчатовский институт”. Подробно рассмотрены состав и основные технические характеристики пяти разрабатываемых комплексов медицинской радиологии, включая комплекс по наработке радионуклидов и четыре комплекса адронной лучевой терапии.

DOI: 10.31857/S0023476122050113

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение
1. Медицинская радиология в России
2. Курчатовский комплекс ядерно-физических установок
2.1. Реакторный комплекс
2.2. Ускорительный комплекс
2.3. Генераторы радионуклидов
2.4. Производство и контроль качества радиофармацевтических лекарственных препаратов
3. Установки Курчатовского научно-образовательного медицинского центра ядерной медицины
3.1. Комплекс по наработке радионуклидов на базе циклотрона Ц-80
3.2. Комплекс протонной лучевой терапии
3.3. Онкоофтальмологический комплекс протонной лучевой терапии на базе циклотрона Ц-80
3.4. Экспериментально-клинический комплекс ионной лучевой терапии на базе действующего ускорительного комплекса У-70
3.5. Прототип типового комплекса ионной лучевой терапии
4. Реализация кластерного подхода в области ядерной медицины на базе научно-технологической инфраструктуры НИЦ “Курчатовский институт”
Заключение

ВВЕДЕНИЕ

Современную систему здравоохранения сложно представить без высокотехнологичного оборудования на основе генерирующих источников ионизирующего излучения (гамма-, электронного, протонного, ионного излучения и т.п.), а также ядерных технологий с использованием радиоизотопов, в том числе применяемых при создании радиофармацевтических лекарственных препаратов (**РФЛП**) (рис. 1).

Представленные ядерно-физические методы, лежащие в основе и относящиеся к области медицинской радиологии, нашли широкое применение в диагностике и лечении не только злокаче-

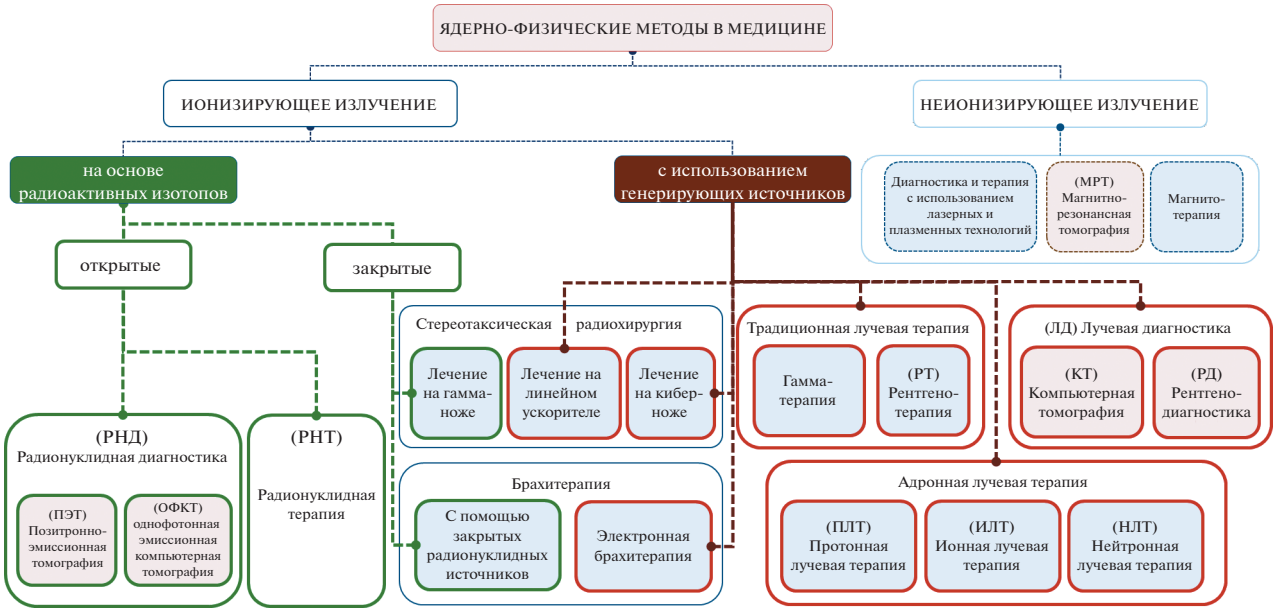


Рис. 1. Ядерно-физические методы, применяемые в медицине.

ственных новообразований, но и сердечно-сосудистых, неврологических, эндокринологических и онкоофтальмологических заболеваний.

Текущее направление развития современной радиологии связано не только с усовершенствованием технологий ранней диагностики заболеваний, позволяющих своевременно и правильно определять дальнейший объем лечения, но и с внедрением современных методов лечения, включая комбинированную таргетную терапию, адронную терапию, тераностику, способствующих повышению качества и увеличению продолжительности жизни, что является одной из стратегических целей, определенных Указом Президента Российской Федерации от 21 июля 2020 г. № 474.

Однако в отличие от международной лечебной практики отечественная медицина до сих пор испытывает дефицит современных мощностей для лечения злокачественных новообразований, которые наряду с сердечно-сосудистыми заболеваниями занимают ведущее место среди причин смерти во всем мире, в том числе в России. По данным Росстата в 2020 г. от болезней систем кровообращения умерли 938.5 тыс. человек (43.9%) и от злокачественных новообразований – 295.9 тыс. человек (13.8%) [1].

1. МЕДИЦИНСКАЯ РАДИОЛОГИЯ В РОССИИ

Сегодня в России в области медицинской радиологии активно применяются методы с использованием рентгеновского, электронного и гамма-излучения, что обусловлено в первую очередь наличием значительного парка соответствующего оборудования, включающего в себя рентгеновские аппараты, линейные ускорители, гамма-ножи и кобальтовые установки.

В последние годы в мировой практике широкое развитие получили методы адронной терапии с использованием ускоренных пучков протонов (протонная лучевая терапия (**ПЛТ**)) и тяжелых ионов углерода (ионная лучевая терапия (**ИЛТ**)), а также относительно новый подход в области персонализированной медицины (тераностика).

В основе тераностики лежит адресная (таргетная) доставка РФЛП, которые являются одновременно и средством ранней диагностики, и терапевтическим агентом, избирательно связывающимся с определенной мишенью. Это позволяет не только осуществлять направленное воздействие, но и контролировать эффективность лечения.

Преимущество методов ПЛТ и ИЛТ заключается в способности максимально точно локализовать лучевое воздействие в области заданного объема за счет реализации эффекта пика Брэгга, что значимо снижает частоту и выраженность радиоиндуцированных реакций по сравнению с фотонной терапией. Кроме того, одним из основных достоинств ИЛТ является высокая эффективность воздействия на радиорезистивные (радиоустойчивые) опухоли.

В настоящее время в мире насчитывается порядка 100 центров ПЛТ, сосредоточенных в основном в США, Японии, Европе и Китае, а также четыре центра низкоэнергетической протонной

Рис. 2. Научно-образовательный медицинский центр ядерной медицины Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”.

терапии для лечения заболеваний глаз. Кроме того, в Японии, Европе и Китае базируется 13 установок ИЛТ.

В России сегодня функционируют лишь три современных центра ПЛТ в Санкт-Петербурге, Димитровграде и Обнинске, два из которых оснащены циклотронами зарубежного производства. Последний оборудован отечественным комплексом ПЛТ “Прометеус”, предусматривающим облучение только опухолей головного мозга, головы и шеи [2]. Отечественная промышленность ПЛТ серийно не производит.

Кроме того, российское здравоохранение использует крайне ограниченный спектр РФЛП, применяемых в ядерной медицине – не более 15 радионуклидов, на основе которых зарегистрировано 53 РФЛП, в то время как в лечебной практике используются более 100 радиоизотопов.

Решение задач развития ядерной медицины предусмотрено мероприятиями Федеральной научно-технической программы (**ФНТП**) развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 гг., утвержденной постановлением Правительства Российской Федерации от 16 марта 2020 г. № 287. Программой предусмотрено создание пяти комплексов медицинской радиологии, входящих в состав будущего Научно-образовательного медицинского центра ядерной медицины (**НОМЦ ЯМ**) Национального исследовательского центра “Курчатовский институт” (**НИЦ “Курчатовский институт”**), а именно (рис. 2):

– распределенный комплекс по наработке радионуклидов и синтезу РФЛП;

– комплекс протонной лучевой терапии (**ПЛТ**);

– онкоофтальмологический комплекс ПЛТ;

– экспериментально-клинический комплекс ионной лучевой терапии (**ЭКК ИЛТ**) на действующем ускорительном комплексе У-70;

– прототип типового комплекса ИЛТ для типового клинического центра ионной (углеродной) лучевой терапии.

Создание НОМЦ ЯМ на базе НИЦ “Курчатовский институт” позволит решить не только обозначенные выше задачи, но и обеспечить развитие современных ядерных центров в других субъектах Российской Федерации при организационно-методической поддержке НИЦ “Курчатовский институт”.

2. КУРЧАТОВСКИЙ КОМПЛЕКС ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

Отметим, что родоначальником развития перспективных и многообещающих ядерно-физических методов в нашей стране стал НИЦ “Курчатовский институт” (рис. 3). Первые технологии, положившие основу современной отечественной ядерной медицины и адронной терапии, появились практически сразу после назначения 10 марта 1943 г. Игоря Васильевича Курчатова научным руководителем работ по использованию атомной энергии в СССР и создания им Лаборатории № 2 АН СССР, в дальнейшем переименованной в НИЦ “Курчатовский институт”. Прежде всего

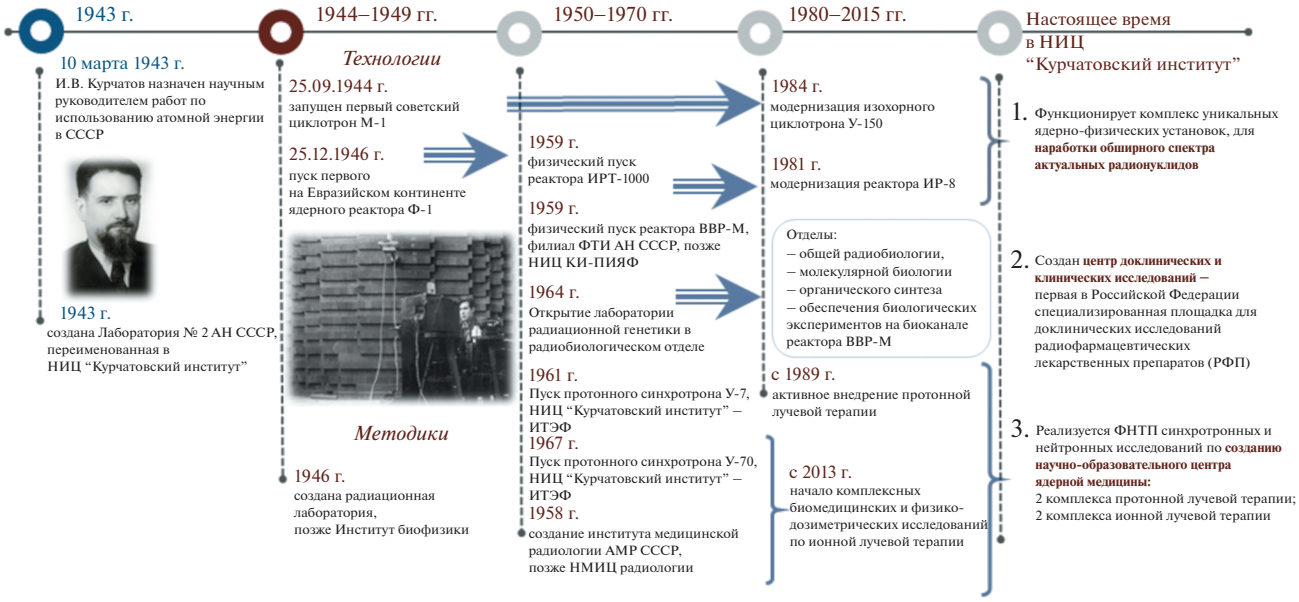


Рис. 3. Хронология развития ядерной медицины и адронной терапии в НИЦ "Курчатовский институт".

это первый советский циклотрон М-1, запущенный в 1944 г., а также первый на Евразийском континенте ядерный реактор Ф-1, пуск которого состоялся 25 декабря 1946 г. Именно они стали прародителями современных отечественных циклотронных и реакторных комплексов сегодняшнего НИЦ "Курчатовский институт".

Кроме того, в послевоенный период в связи с новыми задачами по использованию атомной энергии в мирных целях основными направлениями стало изучение патогенеза, клиники, профилактики и лечения лучевой болезни, разработка методов применения радиоактивных изотопов и других видов ионизирующих излучений для диагностики и лечения. Для изучения влияния радиации на человека и разработки средств защиты в 1946 г. по инициативе И.В. Курчатова в системе Академии наук СССР была создана радиационная лаборатория, позже переименованная в Институт биофизики, которому было поручено изучение биологического действия радиации. Это направление в дальнейшем было продолжено в радиобиологическом отделе филиала Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе АН СССР в Гатчине, позднее преобразованного в НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ, где в 1964 г. была открыта лаборатория радиационной генетики, а позже общей радиобиологии, молекулярной биологии, органического синтеза. Особое внимание уделялось обеспечению биологических экспериментов на биоканале реактора ВВР-М, запущенного в том же институте в 1959 г. Именно такой междисциплинарный подход и слаженная работа ученых и инженерных кадров позволили руководителю отдела молекулярной биологии С.Е. Бреслеру создать новое направление и специальность "биофизика". Сегодня на базе этого отдела создан и достаточно успешно функционирует центр доклинических и клинических исследований Курчатовского института, который стал первой в Российской Федерации специализированной площадкой для доклинических исследований РФЛП.

Третьим направлением, в развитии которого важную роль сыграл атомный проект, стала адронная терапия. Запущенные в 60–70-е годы в Институте теоретической и экспериментальной физики (ИТЭФ), Институте физики высоких энергий (**ИФВЭ**) и Петербургском институте ядерной физики (**ПИЯФ**) протонные синхротроны У-7 и У-70 и синхроциклотрон СЦ-1000 послужили толчком для начала комплексных биомедицинских и физико-дозиметрических исследований в области протонной и ионной терапии, а также внедрения их в клиническую практику. Сегодня в России НИЦ "Курчатовский институт" обладает самым большим опытом в области адронной терапии: с 1969 г. совместно с семью крупнейшими клиниками Москвы и Санкт-Петербурга было пролечено более 5000 пациентов, что составляет около 80% от российского клинического опыта [3, 4].

Безусловно, основой для создания технологий адронной терапии нового поколения, а также разработки новых технологий наработки перспективных радионуклидов является технологическая база.

Как правило, для производства радиоактивных изотопов медицинского назначения исполь-

зуются стабильные изотопы-мишени. Например, реакторные изотопы ^{98}Mo–^{99}Mo, ^{176}Yb–^{177}Lu или циклотронные ^{124}Xe–^{123}I. Практически все технологии разделения стабильных изотопов были разработаны в Курчатовском институте. В настоящее время НИЦ "Курчатовский институт" имеет два электромагнитных сепаратора, основным продуктом которых является изотоп Иттербия-176, каскад газовых центрифуг для производства изотопов ксенона и фотохимическую установку для производства изотопов ртути. Сегодня на базе НИЦ "Курчатовский институт" создан и функционирует комплекс уникальных ядерно-физических установок, включающий в себя три реакторных комплекса (ИР-8, АРГУС и ПИК) и ряд ускорительных комплексов (СЦ-1000, Ц-80, У-150, У-70, Siemens Eclipse), позволяющих нарабатывать обширный спектр актуальных радионуклидов. Уже сегодня в НИЦ "Курчатовский институт" реализуется производство РФЛП на базе изотопа ^{18}F, осуществляется поставка ^{123}I в медицинские организации. Кроме того, в Курчатовском институте осуществляется наработка целого ряда наиболее перспективных терапевтических радионуклидов – это ^{67}Cu, ^{47}Sc, ^{177}Lu, ^{212}Pb, ^{225}Ac, ^{213}Bi, ^{149}Tb, ^{155}Tb, ^{161}Tb, ^{186}Re, ^{230}U и другие (табл. 1) [5, 6].

2.1. Реакторный комплекс

Ядерным реакторам НИЦ "Курчатовский институт" всегда отводилась значимая роль, связанная не только с наработкой радиоактивных изотопов, в том числе применяемых для медицинских целей, но и отработкой и усовершенствованием технологий их получения.

На реакторах проводилась наработка ^{198}Au и ^{51}Cr для последующего производства РФЛП на заводе "Медрадиопрепарат", а также нарабатывался широкий спектр других радионуклидов медицинского назначения. В 1980-х годах на основе стабильного изотопа ^{98}Mo, полученного центрифужным методом, в Институте атомной энергии им. И.В. Курчатова была разработана и внедрена в Институте геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН СССР технология производства ^{99}Mo и генератора ^{99m}Tc большой активности. Пертехнетат натрия, производившийся по этой технологии, поступал в большинство московских отделений радионуклидной диагностики. Сегодня РФЛП, меченные ^{99m}Tc, применяются примерно в 80% всех диагностических процедур однофотонной эмиссионной компьютерной томографии. Поэтому разработка новых эффективных методов получения технеция-99m с использованием реакторов и циклотронов является важной задачей в области ядерной медицины.

С помощью ядерного реактора ИР-8 налажено производство радионуклидов для медицинского применения ^{152}Eu, ^{198}Au, ^{127}Xe, ^{99m}Tc, ^{191}Os, ^{186}Re, ^{197}Hg, ^{153}Sm, ^{51}Cr.

Сегодня реактор ИР-8 имеет 12 горизонтальных экспериментальных каналов для вывода нейтронных пучков и 29 вертикальных каналов в активной зоне и отражателе. Максимальная плотность потока тепловых нейтронов в экспериментальном канале активной зоны ~1.5×10^{14} с$^{-1}$ см$^{-2}$, отражателя ~2.0×10^{14} с$^{-1}$ см$^{-2}$. Максимальная плотность потока быстрых нейтронов ($E \geq 0.5$ МэВ) в экспериментальном канале активной зоны ~1.1×10^{14} с$^{-1}$ см$^{-2}$, отражателя ~4.8×10^{13} с$^{-1}$ см$^{-2}$.

Наиболее перспективной представляется наработка лютеция-177 (^{177}Lu). Этот изотоп является одним из наиболее востребованных терапевтических бета-излучающих радионуклидов для терапии рака, обладает удобным периодом полураспада ($T_{1/2} = 6.71$ сут), приемлемой энергией β-частиц ($E_{макс} = 0.497$ МэВ), мягким сопутствующим γ-излучением ($E_\gamma = 113$ кэВ (6.4%) и 208 кэВ (11%)). Небольшая длина пробега β-частицы ^{177}Lu в биологических тканях (1–3 мм) обеспечивает избирательное уничтожение опухоли при минимальном повреждении окружающих тканей.

В результате совместной работы сотрудников НИЦ "Курчатовский институт", Института биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН и ООО "Технологии медицинских полимеров" были созданы два РФЛП на основе искусственного адресного полипептида ZHER2, специфичного к опухолевому маркеру HER2/neu, и радиоизотопов ^{177}Lu (ZHER2-ЧСА-хелатор-^{177}Lu) и ^{212}Pb (ZHER2-ЧСА-хелатор-212Pb).

Помимо ^{177}Lu на ИР-8 можно нарабатывать такие радионуклиды, как ^{161}Tb, ^{67}Cu и многие другие.

В НИЦ "Курчатовский институт" ведутся разработки малоотходных технологий производства осколочных радионуклидов медицинского назначения в растворных реакторах. Для проведения указанных работ имеется необходимая экспериментальная база – исследовательский растворный мини-реактор "Аргус" тепловой мощностью 20 кВт, успешно эксплуатируемый с 1981 г., радиохимическое оборудование и специализированные помещения для работы с радионуклидами.

Агрегатное состояние топлива – водного раствора уранилсульфата UO_2SO_4 – открывает уникальную возможность селективно отбирать целевые радиоизотопы ^{89}Sr, ^{99}Mo, ^{131}I, ^{133}Xe из топливного раствора, не затрагивая ни ^{235}U, ни основную группу осколочных элементов. Это

Таблица 1. Примеры технологий наработки перспективных радионуклидов, разрабатываемых и внедренных на базе НИЦ “Курчатовский институт”

Радионуклид	Период полураспада $T_{1/2}$		Назначение	Тип распада	Уравнение реакции	Технология получения	Литература
	Значение	Размерность					
Диагностические радионуклиды							
^{18}F	110	мин	ПЭТ	ε+β+ (100%)	^{18}O(p, n) ^{18}F	Ц	
^{68}Ga генератор ^{68}Ge/^{68}Ga	68.3	мин	ПЭТ	ε+β+ (100%)	^{69}Ga(p, 2n) ^{68}Ge → ^{68}Ga	Ц, Г	
^{82}Rb генератор ^{82}Sr/^{82}Rb	1.3	мин	ПЭТ	ε+β+ (100%)	^{nat}Rb(p, x) ^{82}Sr → ^{82}Rb	Ц, Г	
^{89}Zr	78.4	час	ПЭТ, оже-терапия	ε+β+ (100%)	^{89}Y(d, 2n) ^{89}Zr	Ц	[1]
^{99m}Tc	6.05	час	ОФЭКТ	IT (99.9%) β- (0.003%)	^{100}Mo(p, 2n) ^{99m}Tc	Ц	
^{123}I	13.3	час	ОФЭКТ	ε+β+ (100%)	^{124}Xe(p, 2n)^{123}Cs → ^{123}Xe → → ^{123}I ^{124}Xe(p, pn) ^{123}Xe → ^{123}I	Ц	
^{132}La	4.8	час	ПЭТ, оже-терапия	ε+β+ (100%)	^{nat}Ba(α, x) ^{132}La	Ц	
^{135}La	19.5	час	ПЭТ, оже-терапия	ε+β+ (100%)	^{nat}Ba(α, x) ^{135}La	Ц	
^{149}Tb	4.118	час	ПЭТ, α-терапия,	εβ+ (83.3%) α (16.7%)	^{151}Eu(^{3}He, 5n) ^{149}Tb	Ц	[2, 3]
^{152}Tb	17.5	час	ПЭТ, оже-терапия	ε+β+ (100%)	^{151}Eu(α, 4n) ^{152}Tb	Ц	[4]
^{155}Tb	5.32	день	ОФЭКТ, оже-терапия	ε	^{nat}Gd(α, x) ^{155}Dy → ^{155}Tb	Ц	[5]
^{201}Tl	3.04	день	ОФЭКТ	ε	^{203}Tl(p, 3n) ^{201}Pb → ^{201}Tl	Ц	
^{203}Pb	2.16	день	Сцинтиграфия	ε	^{nat}Tl(p, x) ^{203}Pb	Ц	
Терапевтические радионуклиды							
^{103}Ru	39.26	день	Бета-терапия	β	^{100}Th(^{4}He, x) ^{103}Ru	Ц	
^{119}Sb	38.19	час	Оже-терапия	ε	^{nat}Sn(α, x) ^{119}Te(16.03 ч) ^{119}Sb	Ц	
^{131}I	8	день	Бета-радиотерапия (тераностика)	β-	^{130}Te(n, γ) ^{131}Te → ^{131}I ^{235}U(n, f) ^{131}I	Р	
^{161}Tb	6.89	день	Бета-радиотерапия	β-	^{160}Gd (n, γ) ^{161}Gd (3.66 мин) → ^{161}Tb	Р	
^{161}Ho	2.48	час	Оже-терапия	ε	^{nat}Dy(α, x) ^{161}Er → ^{161}Ho	Ц	
^{167}Tm	9.25	день	Оже-терапия	ε	^{nat}Er(α, 2n) ^{167}Yb(17.5 мин) ^{167}Tm ^{165}Ho(α, 2n)^{167}Tm	Ц	[9, 10]
^{165}Er	10.36	час	Оже-терапия	ε	^{165}Ho(α, 4n) ^{165}Tm (30.06 ч) → ^{165}Er(10.36 ч)	Ц	
^{177}Lu	6.6443	дн	β-терапия	β-	^{176}Yb(n, γ) ^{177}Ybβ → ^{177}Lu	Р Р	
^{186}Re	3.7183	день	Бета-радиотерапия, тераностика	β- (7.47%) ε (92.53%)	^{186}W(d, 2n) ^{186}Re	Ц	[6–8]
^{188}Re	3.7183	день	Бета-радиотерапия (тераностика)	β- (7.47%) ε (92.53%)	^{186}W(2n, γ) ^{188}W → ^{188}Re	Р	
^{211}At	7.2	час	Альфа-радиотерапия	E (58.2%) α (41.8%)	^{209}Bi(α, 2n)^{211}At	Ц	
^{212}Pb	10.64	час	Бета-радиотерапия	β-	^{232}Th(p, x)^{228}Th(_ч) → ^{212}Pb ^{233}U(50 лет) → ^{228}Th/^{212}Pb	Ц –	
^{223}U	55	мкс	Альфа-радиотерапия	α	^{232}Th(^{1}H, 3n)^{230} Pa → ^{223}U	Ц	
^{225}Ac	45.6	мин	Терапия, тераностика	β-	^{232}Th(p, 2p xn)^{225}Ac	Ц	

Примечание. Ц – циклотрон, Р – реактор, Г – генератор.

приведет к резкому снижению расхода делящихся материалов в технологическом процессе и выхода высокоактивных отходов. Оценки показывают, что растворный реактор тепловой мощностью ~50 кВт может обеспечить значительную долю современных потребностей РФ в таких важнейших медицинских радиоизотопах, как ^{89}Sr и ^{99}Mo, при резком снижении их себестоимости.

2.2. Ускорительный комплекс

Уникальные возможности НИЦ "Курчатовский институт" в области ускорительных технологий позволяют решать широкий спектр фундаментальных и прикладных исследований, связанных с наработкой диагностических и терапевтических радионуклидов.

Изохронный циклотрон НИЦ "Курчатовский институт" (Циклотрон У-150) работает с 1947 г. и является единственной в Российской Федерации универсальной циклотронной установкой, предназначенной для получения ускоренных пучков заряженных частиц от ионов водорода до ионов кремния. Основные характеристики циклотрона У-150 приведены в табл. 2.

При таких параметрах циклотрона можно производить практически все наиболее востребованные в ядерной медицине циклотронные радионуклиды.

На сегодня на циклотроне У-150 реализованы следующие технологии производства радионуклидов:

– производство ^{201}Tl из ^{203}Tl (твердотельная мишень);

– производство ^{123}I из ^{124}Xe (газовая мишень).

Также проводятся научно-исследовательские работы, связанные с наработкой следующих изотопов: ^{149}Tb, ^{152}Tb, ^{155}Tb, ^{211}At, ^{67}Cu, ^{186}Re, ^{89}Zr, ^{111}In, ^{67}Ga, ^{47}Sc, ^{117m}Sn, ^{119}Sb, ^{64}Cu, ^{68}Ge, ^{124}I, ^{68}Y, ^{82}Sr, ^{44}Ti [7–10].

На базе ускорителя У-150 проведены исследования различных ядерных реакций, приводящих к образованию инновационных радионуклидов, таких как ^{167}Tm, ^{165}Er, ^{169}Yb [11–13].

Также предложены новые способы получения трех изотопов тербия – ^{149}Tb, ^{152}Tb, ^{155}Tb. Сочетание компетенций в области ядерной физики и радиохимии позволило установить оптимальные условия производства этих радионуклидов и разработать методики их радиохимического выделения.

Изотопы тербия (^{149}Tb, ^{152}Tb, ^{155}Tb, ^{161}Tb) представляют особый интерес, так как наличие разных типов излучений и различие в периодах полураспада позволяют создать линейку радиофармпрепаратов, направленных на диагностику и лечение различных видов рака. Сегодня НИЦ "Курчатовский институт" совместно с Московским государственным университетом им. М.В. Ломоносова и Санкт-Петербургским политехническим университетом Петра Великого ведет разработку отечественного инновационного тераностического препарата на основе изотопов тербия для проведения радиоиммунной терапии злокачественных новообразований различного гистологического типа.

Таблица 2. Основные характеристики циклотрона У-150

Тип ионов	Максимальная энергия, МэВ	Интенсивность (максимальная), мкА
Протоны (H+)	35	30 (50)
Дейтроны (2H+)	20	30 (30)
Ионы гелия-3 (3He+2)	70	20 (30)
α-частицы (4He+2)	60	15 (40)

Кроме того, ^{152}Tb может быть использован как изотопная пара к ^{177}Lu. Благодаря позитронному излучению ^{152}Tb можно методом позитронно-эмиссионной томографии (**ПЭТ**) выявить пациентов, имеющих отклик к терапевтическому препарату на основе ^{177}Lu и рассчитать необходимую дозировку препарата [14]. Таким образом, применение новых радионуклидов и их комбинаций позволяет реализовать концепцию персонализированной медицины.

Кроме того, Курчатовский циклотрон У-150 является единственным поставщиком медицинского изотопа ^{123}I для производства радиофармпрепаратов для клиник г. Москвы и Московского региона. Важно отметить высокую социальную значимость РФЛП на основе ^{123}I при диагностике онкологических заболеваний у детей, в том числе характеризующихся агрессивным клиническим течением, таких как нейробластомы. Кроме того, разработанный научным коллективом У-150 в 2021 г. метод облучения мишени ^{124}Xe позволил сегодня увеличить в ~2–3 раза производительность получения ^{123}I.

В НИЦ "Курчатовский институт" также установлен автоматизированный компактный ускоритель отрицательных ионов Eclipse HP Cyclotron (энергия до 11 МэВ) для производства ПЭТ-радионуклидов ^{18}F, ^{11}C, ^{13}N, ^{15}O. Регулярно проводится облучение жидкостных мишеней для производства РФЛП, меченных ^{18}F. Циклотрон является базовой установкой ПЭТ-центра, функционирующего на московской площадке Курчатовского института.

Еще один изохорный циклотрон Ц-80 с энергией выведенного протонного пучка 40–80 МэВ и интенсивностью до 100 мкА расположен в г. Гат-

чина, Ленинградская область. Его запуск был проведен в 2017 г., сегодня ведутся работы по его модернизации с целью создания на базе Ц-80 радиоизотопного комплекса, позволяющего обеспечить производство широкого спектра медицинских циклотронных радионуклидов для лечения целого ряда онкологических, кардио-сосудистых, неврологических и офтальмологических заболеваний.

2.3. Генераторы радионуклидов

Одним из способов получения альфа-излучателей для точечной радиоиммунотерапии является радиохимическое выделение из долго выдержанного сырьевого материала ^{233}U. По совокупности ядерно-физических и медико-биологических параметров наиболее перспективными альфа-излучателями считаются ^{213}Bi и ^{225}Ac. ^{213}Bi является продуктом распада цепочки радионуклидов, начальный элемент которой ^{229}Th может быть получен, например, из старых запасов ^{233}U. Специалистами Курчатовского института совместно с сотрудниками Объединенного института ядерных исследований разработаны генераторные способы получения ^{225}Ac из ^{229}Th, ^{213}Bi из ^{225}Ac и ^{212}Pb из ^{228}Th.

2.4. Производство и контроль качества радиофармацевтических лекарственных препаратов

Со дня основания в НИЦ “Курчатовский институт” реализуется междисциплинарный подход, нацеленный на замкнутый цикл: от проведения фундаментальных исследований до внедрения конечных технологий.

Сегодня в Курчатовском институте на базе циклотрона Eclipse HP создано производство серии РФЛП для диагностики злокачественных заболеваний методом ПЭТ на основе ^{18}F. Это ^{18}F-фтордезоксиглюкоза, ^{18}F-PSMA-1007, ^{18}F-фторхолин. Для получения РФЛП используются автоматические модули синтеза, установленные в защитных боксах. Препарат производится постоянно и применяется в медицинских учреждениях Москвы. Производство и контроль качества осуществляются в соответствии с требованиями **GMP** (Good Medical Practice).

Создание новых РФЛП невозможно без проведения полноценных доклинических исследований на животных. Сегодня на базе НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ успешно функционирует исследовательский комплекс отделения молекулярной и радиационной биофизики, имеющий в своем составе центр доклинических и клинических исследований (**ЦДКИ**) – опытно-производственную научную лабораторию мирового уровня, включающую в себя экспериментально-биологическую клинику и радиофармакологический блок. ЦДКИ позволяет проводить полный цикл фундаментальных, скрининговых и доклинических исследований лекарственных препаратов различных фармакологических групп и их компонентов (за исключением работ с особо опасными инфекциями и наркотическими и психотропными соединениями), средств ядерной медицины (2 класс работ с источниками ионизирующего излучения) с их последующим внедрением в клиническую практику в соответствии с принципами Good Laboratory Practice, национальными и международными стандартами.

В рамках реализации ФНТП планируется расширение имеющегося потенциала в рамках реализации проектов “ОКО”–“ИЗОТОП” – модернизация циклотрона Ц-80, на базе которого будет создан типовой радиохимический комплекс по наработке радионуклидов с последующим синтезом РФЛП на их основе, а также запланировано создание четырех комплексов адронной терапии, входящих в состав НОМЦ ЯМ НИЦ “Курчатовский институт”, а именно:

– комплекс протонной лучевой терапии НИЦ “Курчатовский институт”, г. Москва (проект “Луч-Протон”);

– онкоофтальмологический комплекс ПЛТ на базе циклотрона Ц-80 НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ, г. Гатчина (проект “ОКО”);

– экспериментально-клинический комплекс ионной лучевой терапии на базе действующего ускорительного комплекса У-70 НИЦ “Курчатовский институт” – ИФВЭ, г. Протвино (проект “Луч У70”);

– прототип типового комплекса ионной лучевой терапии в составе типового клинического центра ионной (углеродной) лучевой терапии с целью последующего тиражирования в регионах РФ НИЦ “Курчатовский институт” – ИФВЭ, г. Протвино (проект “Луч-Тип-Ион”).

3. УСТАНОВКИ КУРЧАТОВСКОГО НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО МЕДИЦИНСКОГО ЦЕНТРА ЯДЕРНОЙ МЕДИЦИНЫ

3.1. Комплекс по наработке радионуклидов на базе циклотрона Ц-80

Создание инновационного радиоизотопного комплекса на базе действующего циклотрона Ц-80 (“ИЗОТОП”), расположенного на территории НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ, предназначено для наработки широкого спектра медицинских радионуклидов, используемых при диагностике и терапии онкологических заболеваний. Основные параметры протонного пучка, используемого для наработки радионуклидов, приведены в табл. 3. Радионуклиды, планируемые

к получению в рамках реализации проекта “ИЗОТОП”, представлены в табл. 4 и 5.

Создаваемый радиоизотопный комплекс будет иметь в своем составе следующее новое оборудование и системы:

– инновационная масс-сепараторная мишенная станция;

– мишенная станция для высокотемпературного выделения целевых радионуклидов;

– мишенная станция для радиохимического выделения целевых радионуклидов.

План расположения основных узлов технологического оборудования схематически представлен на рис. 4.

Подобный уникальный комплекс позволит обеспечить наработку как генераторных радионуклидов ^{82}Sr и ^{68}Ge, так и альфа-эмиттеров высокой частоты ^{225}Ac для терапии злокачественных образований на ранней стадии. Кроме того, подобный комплекс позволит получать широкий спектр радионуклидов, включая ^{212}Pb, ^{223}Ra, ^{224}Ra, а в перспективе создать инновационную GMP-лабораторию для организации замкнутого цикла по разработке и производству РФЛП.

Назначение инновационного радиоизотопного комплекса на базе действующего циклотрона Ц-80 не ограничивается получением широкого спектра радиоизотопов и изотопически чистых медицинских радионуклидов с использованием инновационного масс-сепараторного метода. Планируется многолетнее использование комплекса для разработки перспективных методов получения радионуклидов для диагностики и терапии различных онкологических и других заболеваний, проведение образовательных программ и подготовка высококвалифицированных кадров.

Таблица 3. Параметры протонного пучка

Параметр	Значение
Энергия протонов, МэВ	40–80
Максимальная интенсивность, мкА	100
Диаметр на входе в мишень, мм	20–50
Неравномерность плотности тока по сечению, %	не более ±3
Максимальное время облучения в непрерывном режиме, ч	300

Таблица 4. Радионуклиды, планируемые к получению

Наименование	$T_{1/2}$	Активность (Ки)
^{68}Ge	270.8 дн.	2
^{82}Sr	25.55 дн.	14
^{99}Tc	6.0 ч	8
^{64}Cu	12.4 дн.	26
^{67}Cu	2.58 дн.	8
^{212}Bi	1.01 ч	0.45

Таблица 5. Радионуклиды, планируемые к получению изотопически чистыми (с использованием масс-сепаратора)

Наименование	$T_{1/2}$	Активность (Ки)
^{111}In	2.8 дн.	14
^{123}I	13.27 ч	25
^{124}I	4.17 дн.	60
^{149}Tb	4.1 ч	3
^{223}Ra	11.4 дн.	3
^{224}Ra	3.66 дн.	0.45
^{225}Ac	10.0 дн.	0.12

3.2. Комплекс протонной лучевой терапии

Создание комплекса протонной лучевой терапии (“Луч-Протон”), размещаемого на территории НИЦ “Курчатовский институт”, предназначено для многолетних разработок оборудования и технологий ПЛТ новых поколений и подготовки кадров (медицинских физиков и клиницистов).

Основные параметры комплекса протонной лучевой терапии (**Комплекс ПЛТ**) НИЦ “Курчатовский институт” приведены в табл. 6.

Концепцией создания комплекса “Луч-Протон” предусмотрены разработка и оснащение комплекса тремя основными элементами оборудования – ускоритель с каналами транспортировки протонных пучков в два процедурных помещения, лучевая установка гантри для многопольного облучения пациента в положении лежа и лучевая установка с фиксированным в горизонтальной плоскости направлением протонного пучка для облучения пациента в положении сидя.

В качестве ускорителя для Комплекса ПЛТ НИЦ “Курчатовский институт” будет разработан протонный синхротрон, позволяющий осуществлять выбор энергии выводимых из него пучков протонов в диапазоне от 70 до 250 МэВ и изменять ее от одного цикла ускорения к другому. Таким образом, вывод протонов не при максимальной, как в циклотроне, а при требуемой для конкретного пациента энергии и высокая эффективность вывода делают протонный синхротрон более удобной машиной в эксплуатации и более безопасной в радиационном смысле.

Отметим, что гибкая конфигурация Комплекса “Луч-Протон” (рис. 5) предлагает комплексное и настраиваемое решение для ПЛТ, позволяет оснащать как однокабинные, так и многокабин-

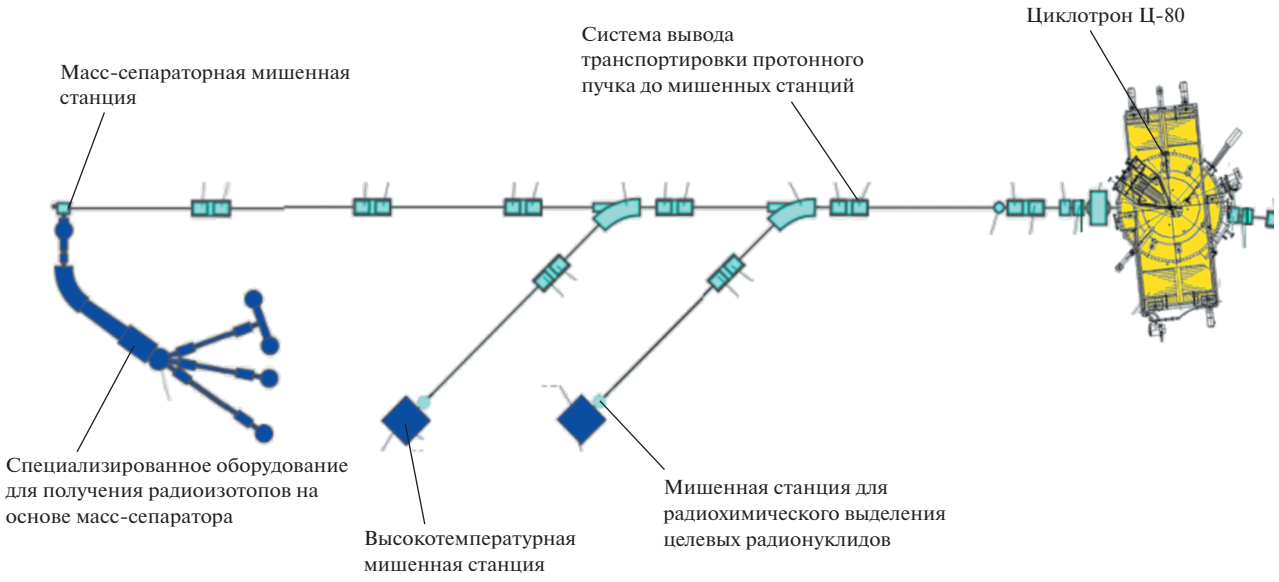


Рис. 4. Схема конфигурации комплекса “ИЗОТОП”.

ные центры в соответствии с клиническими и исследовательскими задачами. Возможные варианты процедурных кабинетов включают в себя гантри полного (на 360°) поворота протонного пучка, кабинета с фиксированным направлением протонного пучка для проведения терапии пациентов с новообразованиями глаза, головы и шеи в положении сидя, исследовательские кабинеты для неклинического применения пучка протонов.

Таблица 6. Основные характеристики комплекса “Луч-Протон”

	Наименование параметра установки	Значение
1	Ускорительный комплекс	
1.1	Ускоритель	Протонный синхротрон
1.2	Энергия ускоренных протонов	70–250 МэВ
1.3	Интенсивность	5×10^{10} протонов в секунду
2	Лучевая установка Гантри	
2.1	Энергия протонов	70–250 МэВ
2.2	Поворот протонного пучка	±185°
2.3	Система формирования дозового распределения	активно/пассивная
2.4	Максимальный размер дозового распределения	$25 \times 25 см^2$
2.5	Система позиционирования	2D-и3D-системарентгеновскогопозиционирования
2.6	Позиционер	6D-стол позиционер
2.7	Локализации	– голова, шея; – новообразования абдоминальной области
3	Лучевая установка с фиксированным направлением протонного пучка	
3.1	Энергия протонов	70–250 МэВ
3.2	Система формирования дозового распределения	пассивная
3.3	Максимальный размер дозового распределения	$25 \times 25 см^2$
3.4	Система позиционирования	2D-система рентгеновского позиционирования
3.5	Позиционер	кресло позиционер
3.6	Локализации	– голова, шея; – внутриглазные новообразования; – новообразования орбиты глаза

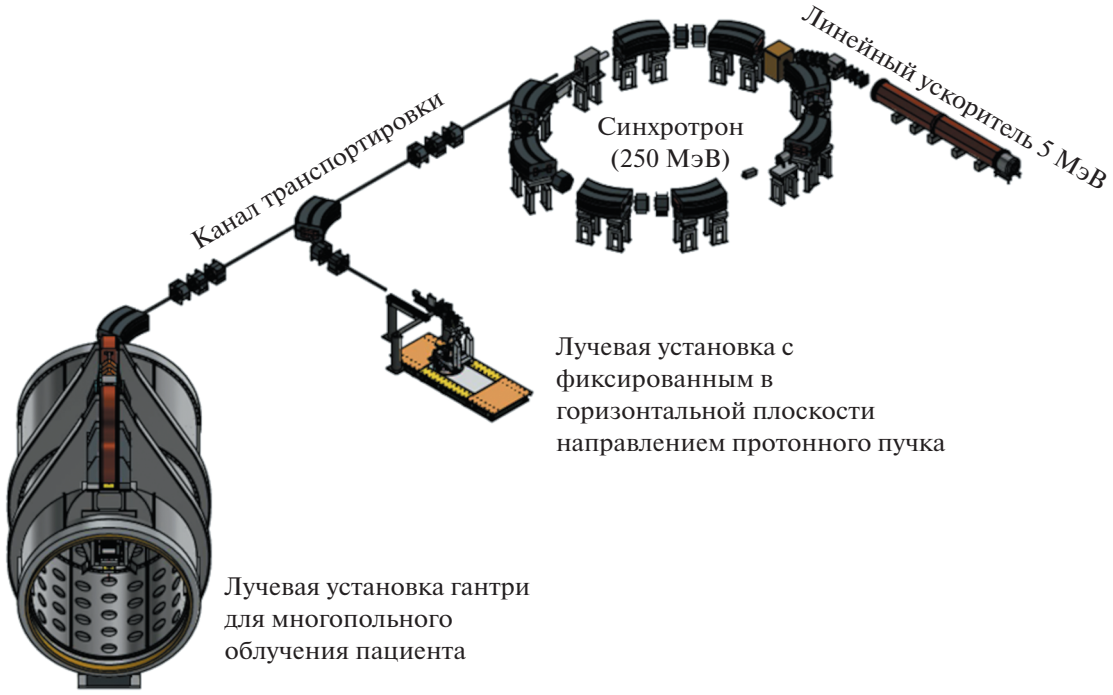


Рис. 5. Схема конфигурации комплекса “Луч-Протон”.

Оборудование и технологии ПЛТ в последние три десятилетия во всем мире постоянно совершенствуются, предлагаются и отрабатываются новые, зачастую принципиальные решения, которые затем внедряются в рутинную практику лечения. В соответствии с этой общемировой тенденцией назначение Комплекса ПЛТ НИЦ “Курчатовский институт” не ограничивается созданием опытного образца типового клинического центра ПЛТ. Планируется долговременное многолетнее использование Комплекса ПЛТ НИЦ “Курчатовский институт” для развития проблемы – разработки и испытаний новых аппаратных средств и технологий ПЛТ, а также подготовки кадров.

3.3. Онкоофтальмологический комплекс протонной лучевой терапии на базе циклотрона Ц-80

Создание онкоофтальмологического комплекса на базе действующего циклотрона Ц-80, размещаемого на территории НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ (“ОКО”), предназначено для обеспечения высокотехнологичными средствами лечения пациентов со сложными онкоофтальмологическими заболеваниями Северо-Западного региона России и частично из других регионов страны. Основные параметры онкоофтальмологического комплекса на базе действующего циклотрона Ц-80 приведены в табл. 7.

Создаваемый онкоофтальмологический комплекс будет иметь в своем составе следующее новое оборудование и системы:

Таблица 7. Основные характеристики комплекса “ОКО”

Наименование	Значение
Энергия протонов	70 МэВ
Интенсивность	1.0–1.5 мкА
Диаметр	60 мм
Расходимость	не более 3 мрад
Неравномерность плотности тока по сечению	не более ±3%
Высота оси пучка относит пола процедурного кабинета	1500 мм
Система формирования дозового распределения	пассивная
Система позиционирования	2D-система рентгеновского позиционирования
Позиционер	кресло позиционер
Локализации	– внутриглазные новообразования; – новообразования орбиты глаза

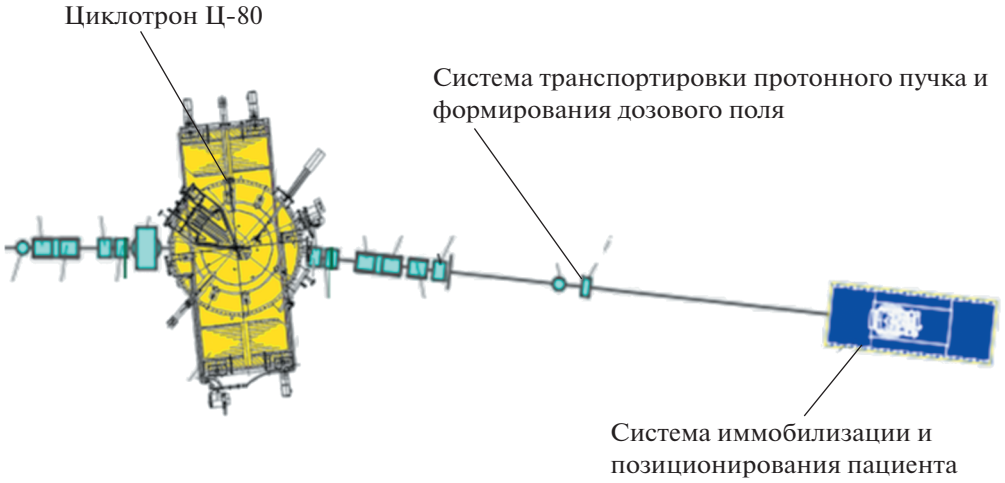


Рис. 6. План расположения основных узлов технологического оборудования.

– инновационное кресло-позиционер с системой управления;

– устройство транспортировки терапевтического протонного пучка от ускорителя к лучевой установке (**ЛУ**);

– устройства формирования дозового поля;

– система мониторинга пучка и поглощенной дозы;

– система позиционирования пациента;

– программно-аппаратный комплекс (**ПАК**), интегрированный в автоматизированную систему управления технологическим процессом и лучевой установкой (**АСУ ТП** и **АСУ ЛУ**);

– помещение для подготовки пациентов к процедуре.

Предполагаемый план расположения основных узлов технологического оборудования схематически представлен на рис. 6.

В результате реализации проекта северо-западный регион России будет обеспечен высокотехнологичными медицинскими средствами лечения сложных онкоофтальмологических заболеваний: внутриглазных новообразований, новообразований орбиты и придаточного аппарата глаза.

3.4. Экспериментально-клинический комплекс ионной лучевой терапии на базе действующего ускорительного комплекса У-70

Создание экспериментально-клинического комплекса ионной лучевой терапии (**Комплекс ИЛТ**) на базе действующего ускорительного комплекса У-70 (“Луч У-70”), размещаемого на территории НИЦ “Курчатовский институт” – ИФВЭ, предназначено для отработки технологии лечения пучком ионов углерода пациентов с радиорезистентными онкологическими новообразованиями. В дальнейшем данный центр будет также использоваться для многолетних разработок оборудования и технологий ИЛТ новых поколений и подготовки кадров (медицинских физиков и клиницистов).

Основные параметры экспериментально-клинического комплекса ионной лучевой терапии на базе действующего ускорительного комплекса У-70 НИЦ “Курчатовский институт” – ИФВЭ приведены в табл. 8.

В качестве ускорителя для экспериментально-клинического комплекса ионной лучевой терапии будет использована действующая ускорительная инфраструктура У-70 НИЦ “Курчатовский институт” – ИФВЭ.

Создаваемый экспериментально-клинический комплекс будет иметь в своем составе следующее новое оборудование и системы:

– комплекты магнитооптического оборудования для формирования и транспортировки углеродного пучка в три медицинские кабины;

– растровые системы формирования полей облучения для лечения по двум методикам: облучение “широким” и “узким” (карандашным) пучками;

– сертифицированные комплекты оборудования для дозиметрического (верификация дозы облучения) и рентгеновского (верификация зон облучения) сопровождения терапии;

– три медицинские кабины с комплексом медицинского оборудования;

– прецизионный шестикоординатный стол для позиционирования пациента (в каждой медицинской кабине) согласно рис. 7.

Конфигурация комплекса представлена на рис. 8.

Назначение Комплекса “Луч У-70” не ограничивается клинической апробацией технологий лечения онкологических новообразований с использованием ИЛТ. Планируются многолетнее

использование Комплекса для разработки протоколов лечения онкологических новообразований различных нозологий, устойчивых к другим видам излучений, используемым в лучевой терапии, проведение образовательных программ и подготовка высококвалифицированных кадров.

3.5. Прототип типового комплекса ионной лучевой терапии

Создание прототипа типового комплекса ионной лучевой терапии ("Луч-Тип-Ион"), размещаемого на территории НИЦ "Курчатовский институт" – ИФВЭ, предназначено для освоения и отработки технологии поточного лечения пучком ионов углерода радиорезистентных онкологических новообразований с целью дальнейшего тиражирования.

Основные параметры синхротрона для прототипа типового комплекса ионной лучевой терапии НИЦ "Курчатовский институт" – ИФВЭ приведены в табл. 9.

Концепцией создания комплекса "Луч-Тип-Ион" предусмотрены разработка и оснащение комплекса следующим новым оборудованием и системами:

– специализированный углеродный синхротрон для лучевой терапии;

– комплекты магнитооптического оборудования формирования и транспортировки углеродного пучка в три медицинские кабины;

– растровые системы формирования дозового поля облучения для лечения по методике сканирования опухоли "узким" (карандашным) пучком;

– сертифицированные комплекты оборудования для дозиметрического (верификация дозы облучения) и рентгеновского (верификация зон облучения) сопровождения терапии;

– прецизионный шестикоординатный стол для позиционирования пациента (в каждой медицинской кабине).

Компоновку комплекса предполагается реализовать аналогичной уже действующим ионным комплексам The Heidelberg Ion Therapy Center (**HIT**) и The Marburg Particle Therapy Center (**MIT**) в Германии и применить отечественные апробированные технические решения, такие как источник ионов, инжектор, линейный ускоритель и другие системы синхротрона.

На рис. 9 показано компоновочное решение, которое реализуется при проектировании.

Система каналов транспортировки обеспечивает доставку пучка ионов углерода от синхротрона к трем медицинским процедурным кабинам.

Две процедурные кабины предполагается использовать для облучения пациентов горизон-

Таблица 8. Основные параметры экспериментально-клинического комплекса ионной лучевой терапии

Наименование	Значение
Кинетическая энергия ионов $_{12}C^{6+}$ МэВ на нуклон	150–450
Пробег в воде максимальный	280 мм в мишени
Пробег в воде минимальный	50 мм
Точность подстройки пробега	1 мм
Средняя мощность дозы	2 Гр/мин
Размер поля облучения	200 × 200 мм^2
Максимальный облучаемый объем	2 л
Равномерность дозы	±2.5%
Система вывода пучков из ускорителя	медленный вывод, синхронный с дыханием пациента
Количество процедурных кабин	≥3
Предполагаемые направления пучков, направляемых на мишень	2 горизонтальных (0°) 1 наклонное (до 45°)
Время укладки пациента	30 мин
Время облучения пациента	2–3 мин

Таблица 9. Основные параметры синхротрона для прототипа типового комплекса ионной лучевой терапии

Наименование	Значение
Кинетическая энергия ионов $_{12}C^{6+}$МэВ на нуклон	150–430
Максимальная магнитная жесткость $B\rho$, Тл м	6.62
Максимальное поле в поворотных магнитах B, Тл	1.3–1.4
Радиус кривизны орбиты в поворотных магнитах ρ, м	5.10
Длина орбиты П, м	79.92
Средний радиус орбиты $R = П/2\pi$, м	12.7
Отношение длины магнитной дорожки к периметру орбиты, $2\pi\rho/П = \rho/R$	0.4
Количество суперпериодов магнитной структуры	6
Количество поворотных магнитов D (15°)	24
Структура фокусировки	FODO (π/2)
Количество квадрупольных линз, из них:	36
фокусирующих QF,	18
дефокусирующих QD	18

Рис. 7. Внешний вид прецизионного 6D-стола для облучения пациентов горизонтальным пучком.

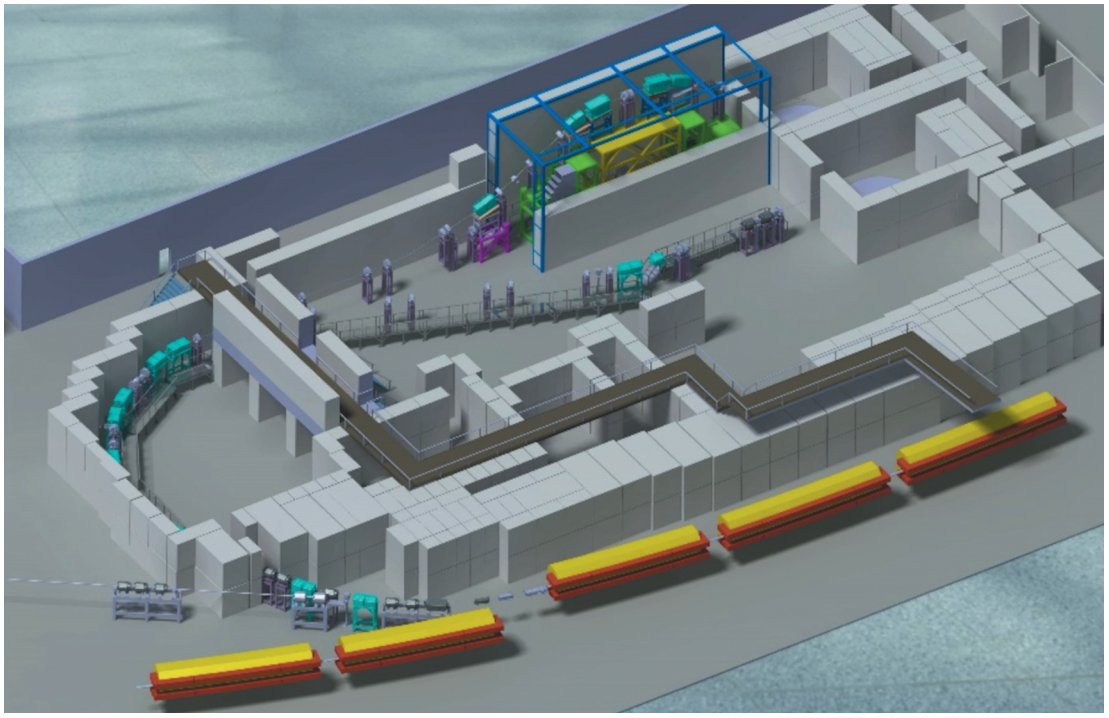


Рис. 8. Конфигурация экспериментально-клинического комплекса ионной лучевой терапии.

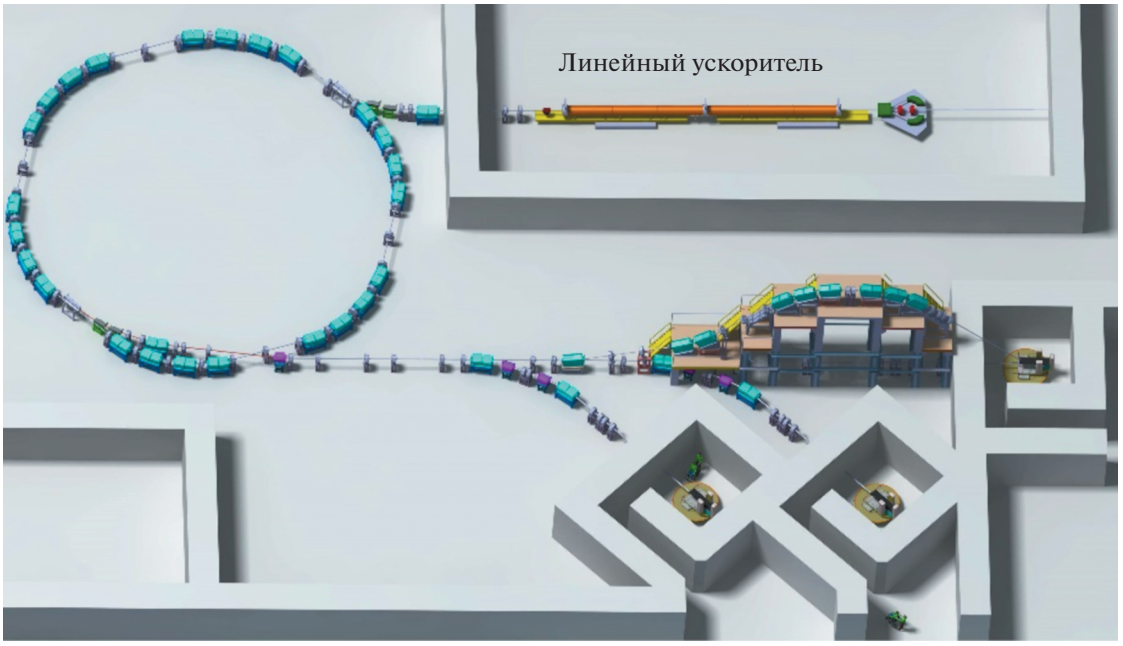


Рис. 9. Вид ионного лучевого терапевтического комплекса с тремя горизонтальными пучками и одним пучком 45° в вертикальной плоскости.

тальными пучками (0°), а третью – горизонтальным пучком и наклонным пучком с углом наклона 45° в вертикальной плоскости.

Оборудование и технологии ИЛТ в последние три десятилетия во всем мире постоянно совершенствуются, предлагаются и отрабатываются новые, зачастую принципиальные решения, которые затем внедряются в рутинную практику лечения. В соответствии с этой общемировой тенденцией назначение Комплекса ИЛТ “Луч-Тип-Ион” не ограничивается созданием опытного образца типового клинического центра ИЛТ. Планируется многолетнее использование Комплекса ИЛТ “Луч-Тип-Ион” для поточного лечения пациентов и развития проблемы – разработки протоколов лечения онкологических новообразований различных нозологий, устойчивых к другим видам излучений, используемым в лучевой терапии, а также подготовки кадров.

4. РЕАЛИЗАЦИЯ КЛАСТЕРНОГО ПОДХОДА В ОБЛАСТИ ЯДЕРНОЙ МЕДИЦИНЫ НА БАЗЕ НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ НИЦ “КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ”

Уже сегодня проекты, реализуемые на базе НИЦ “Курчатовский институт”, позволяют говорить об активном развитии в стране направления ядерной медицины и внедрении единого кластерного подхода, позволяющего сформировать междисциплинарную платформу для введения полного цикла создания ядерных и ускорительных технологий от научно-исследовательских и опытных разработок до их внедрения и применения в клинической практике, а также снижения барьеров выхода на новые сегменты рынка товаров за счет стандартизации и унификации требований, обеспечения комплексного подхода в рамках кластера.

В рамках реализации ФНТП подобный кластер будет сформирован на основе описанного выше НОМЦ ЯМ НИЦ “Курчатовский институт” (рис. 10), представляющего собой научную и физико-техническую базу для разработки и создания отечественного типового клинического модульного (с возможностью вариабельности структуры и состава отделений) центра ядерной медицины для субъектов Российской Федерации.

В Курчатовском НОМЦ ЯМ с привлечением при необходимости профильных научных, образовательных и медицинских организаций будет проводиться не только разработка, но и клиническая апробация и отработка современных методов диагностики и лечения пациентов, основанных на применении ядерных технологий и соответствующего отечественного оборудования.

Учитывая имеющий место кадровый дефицит российского здравоохранения, подобный центр, оснащенный широким спектром современной радиологической аппаратуры и располагающий высококвалифицированными специалистами, будет, несомненно, обладать высоким потенциалом для организации образовательной деятельности. В качестве образовательной базы будет ис-

Рис. 10. Кластер ядерной медицины на основе НОМЦ ЯМ НИЦ “Курчатовский институт”.

пользоваться уже имеющаяся инфраструктура НИЦ “Курчатовский институт” и создаваемая в рамках ФНТП, а также клиническая база медицинских организаций – партнеров.

Кроме того, подобная инфраструктура позволит обеспечить научно-методическое, физико-техническое и экспертное сопровождение при проектировании модульных клинических центров ядерной медицины.

Таким образом, возможность тиражирования и оснащения российского здравоохранения подобными типовыми центрами ядерной медицины позволит существенно повысить доступность высокотехнологичной медицинской помощи в стране и внесет существенный вклад в достижение национальных целей, определенных Указом Президента Российской Федерации от 21 июля 2020 г. № 474 “О национальных целях развития Российской Федерации на период до 2030 года”.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Современное развитие ядерной медицины и медицинской радиологии неразрывно связано с применением междисциплинарных подходов, обеспечением доступности широкого спектра нового оборудования и методов, а также оперативным внедрением соответствующих инновационных технологий и методик в медицинскую практику.

Основоположник развития ядерной медицины и лучевой терапии в нашей стране НИЦ “Курчатовский институт” на сегодня представляет собой место консолидации трех ключевых составляющих, необходимых для создания новых поколений оборудования и методов в области ядерной медицины и лучевой терапии: знания и компетенции в области создания и внедрения ядерных и ускорительных технологий, уникальная ядерно-физическая инфраструктура и высококвалифицированные специалисты, обладающие богатым междисциплинарным опытом работы.

Создание НОМЦ ЯМ позволит значительно расширить имеющийся потенциал за счет разработки и внедрения современного оборудования отечественного производства, а также создания прототипа типового клинического центра ядерной медицины. Кроме того, реализация кластерного подхода в рамках данного проекта позволит сформировать междисциплинарную платформу для внедрения полного цикла создания ядерных и ускорительных технологий: от научно-исследовательских и опытных разработок до применения их в клинической практике.

Таким образом, возможность тиражирования и оснащения российского здравоохранения подобными типовыми центрами ядерной медицины на базе отечественного оборудования позволит существенно повысить доступность высокотехнологичной медицинской помощи в стране и внесет существенный вклад в достижение национальных целей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Агеева Л.И., Александрова Г.А., Голубев Н.А. и др.* // Росстат. 2021. С. 37.
2. *Gordon K.B., Smyk D.I., Gulidov I.A.* // Современные технологии в медицине. 2021. Т. 13. № 4. С. 70. https://doi.org/10.17691/stm2021.13.4.08
3. *Забелин М.В., Климанов В.А., Галяутдинова Ж.Ж. и др.* // Исследования и практика в медицине. 2018. Т. 5. № 1. С. 82. https://doi.org/10.17709/2409-2231-2018-5-1-10
4. *Клёнов Г.И., Хорошков В.С.* // Успехи физ. наук. 2016. Т. 186. № 8. С. 891.
5. *Aliev R.A., Zagryadskiy V.A., Kormazeva E.S. et al.* // Atomic. Energy.2021 V. 130. P. 36. https://doi.org/10.1007/s10512-021-00770-3
6. *Moiseeva A.N., Aliev R.A., Kormazeva E.S. et al.* // Appl. Radiat. Isot. 2021. V. 609–170. P. 109.
7. *Kazakov A.G., Aliev R.A., Ostapenko V.S. et al.* // J. Radioanal. Nucl. Chem. 2018. V. 605–11. P. 317.
8. *Moiseeva A.N., Aliev R.A., Unezhev V.N. et al.* // Sci. Rep. 2020. V. 10. P. 508.
9. *Aliev R.A., Zagryadskiy V.A., Latushkin S.T. et al.* // At. Energy. 2021. V. 326–8. P. 129.
10. *Moiseeva A.N., Aliev R.A., Furkina E.B. et al.* // Nucl. Med. Biol. 2021. V. 106–107. P. 52.
11. *Kormazeva E.S., Khomenko I.A., Unezhev V.N., Aliev R.A.* // Appl. Radiat. Isot. 2021. V. 177. P. 109.
12. *Алиев Р.А., Кормазева Е.С., Фуркина Е.Б. и др.* // Российские нанотехнологии. 2020. Т. 15. С. 451.
13. *Aliev R.A., Khomenko I.A., Kormazeva E.S.* // J. Radioanal. Nucl. Chem. 2021. V. 983–989. P. 329. https://doi.org/10.1007/s10967-021-07865-y
14. *Moiseeva A.N., Aliev R.A., Unezhev V.N. et al.* // Nucl. Instrum. Methods. B . 2021. V. 497. P. 59.

EDN: XWSKDE
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 818–830

УДК 539.26

ИНТЕГРАЦИЯ ЕСТЕСТВЕННО-НАУЧНОГО И ГУМАНИТАРНОГО ЗНАНИЯ В ИСТОРИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

© 2022 г. Е. Б. Яцишина[1,*], М. В. Ковальчук[1]

[1] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия*

*****E-mail: Yatsishina_EB@nrcki.ru*

Поступила в редакцию 08.04.2022 г.
После доработки 08.04.2022 г.
Принята к публикации 19.04.2022 г.

Одной из доминирующих тенденций развития современной науки является интеграция естественно-научного и гуманитарного знаний. Исходя из того что один из основных типов источников, на которые опирается историческая наука, – вещественные, значение исследований материала этих источников крайне велико. Полученные в ходе исследований характеристики материалов артефактов, из которых они созданы, в соединении с различными методами исторического исследования значительно дополняют и повышают источниковедческий потенциал объектов культурного наследия. Схожим набором естественно-научных методов исследуются материалы и применительно к произведениям искусства, что в сочетании с искусствоведческим анализом дает возможность решить целый ряд задач научной реставрации.

DOI: 10.31857/S0023476122050137

ВВЕДЕНИЕ

При помощи естественно-научных методов можно получить детальную информацию об элементном и фазовом составе материала, его структуре, происхождении, особенностях исследуемого объекта, наружных повреждениях или внутренних дефектах и других параметрах. Такие сведения дают возможность реконструировать процессы получения и обработки материала, нюансы технологий изготовления и дальнейшего бытования объекта. В сочетании со сравнительно-типологическим методом и данными письменных источников (если они имеются) такой комплементарный подход позволяет получить наиболее полную информацию об объектах культурного наследия различной природы и происхождения. Тем самым удается ввести в научный оборот новые исторические данные, повысить достоверность атрибуции исследуемых объектов, глубже интерпретировать связанный с ними исторический контекст.

Применяемые естественно-научные методы исследования объектов культурного наследия в большинстве своем не нарушают их целостности, но дают важную информацию о состоянии артефакта, выявляя, в том числе, невидимые глазу повреждения. Эти данные крайне важны для выбора оптимальных методик и способов реставрации, объективной атрибуции, экспонирования или консервации, определения наилучших условий дальнейшего хранения объектов. Таким образом, наряду с историками и археологами во всестороннем изучении материала артефактов схожим комплексом естественно-научных методов заинтересованы и научные реставраторы, искусствоведы, музееведы.

Предлагается закрепить за этим направлением термин историческое материаловедение, как отражающий в полной мере его междисциплинарный характер, интеграцию естественной и гуманитарной составляющей и предполагающий широкую трактовку применительно как к археологии, так и к научной реставрации.

ИНТЕГРАЦИЯ НАУК КАК ОТРАЖЕНИЕ ВНУТРЕННИХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ РАЗВИТИЯ НАУКИ

Одна из всеобщих закономерностей исторического развития науки состоит в том, что формирование новых направлений идет в диалектическом взаимодействии с возникновением интегрирующих областей. Вопросы взаимосвязи процессов дифференциации и интеграции в ходе развития науки рассматривали не только философы и историки науки [1], но и представители естественного блока [2, 3].

Например, В.И. Вернадский, будучи одним из крупнейших минералогов, кристаллографов, не только расширил границы своей деятельности на

почвоведение, химию, биохимию, геологию, заложив также основы радиогеологии, но и стал основателем такого междисциплинарного научного направления, как биогеохимия. В своем научном творчестве он также уделял значительное место истории науки, глубоко анализировал ее внутренние процессы. В основополагающем труде "Научная мысль как планетное явление" В.И. Вернадский объяснял процессы интеграции научных дисциплин, развивающиеся в этот период, тем, что проблемы научного знания "все чаще не укладываются в рамки отдельной, определенной, сложившейся науки. ⟨...⟩ вышедшие за пределы одной науки, неизбежно создают новые области знания, новые науки, все увеличивающиеся в числе и в быстроте своего появления" [4].

Идеи междисциплинарности, распространявшиеся постепенно не только на естественно-научное, но и гуманитарное знание, В.И. Вернадский, которого можно назвать натурфилософом XX века, развил в своем учении о биосфере и позже – ноосфере, ставшем по своей сути новым естественно-философским мировоззрением [5].

В.И. Вернадский выделяет ведущую роль в ноосфере разума человека, его интеллекта, творческого начала. Все это невозможно без развития гуманитарной компоненты, или, как называет ее ученый, науки о "духовном творчестве человеческой личности в ее социальной обстановке" [5].

После Второй мировой войны в рамках атомного и космического проектов в период бурного развития вступили все естественные науки и связанные с ними технологии. Это привело к появлению и расширению сферы междисциплинарных исследований и технологий, таких как, например, кибернетика, генетика, робототехника, объединивших самые различные научные направления.

В 1960–1970-е годы процессы объединения, синтеза наук активизировались, развитие науки все более определялось потребностями в интеграции различных научных направлений и естественно-научного, и гуманитарного блоков. Особенно важным с прикладной точки зрения для объединения наук стало появление общих для разных дисциплин методов исследований. В последние десятилетия процессы интеграции охватили и сферу социогуманитарного знания, которое сегодня активно взаимодействует с естественно-научным через синтез идей и методов, обмен технологиями, формирование общих задач.

Одним из наиболее ярких примеров интеграции естественных и гуманитарных наук на современном этапе расширения междисциплинарности является изучение объектов культурного наследия естественно-научными методами – историческое материаловедение. Формирование этого междисциплинарного направления длилось не одно десятилетие. По мере развития естественных наук расширялся спектр используемых для исследования объектов культурного наследия методов и инструментария: от первого фотоаппарата и микроскопа до источников синхротронного излучения и нейтронов. Однако неизменным оставался предмет исследования – материал объекта, изучение которого естественно-научными методами давало новую информацию для историков, археологов, искусствоведов.

ВОЗНИКНОВЕНИЕ И ВНЕДРЕНИЕ ЕСТЕСТВЕННО-НАУЧНЫХ МЕТОДОВ В АРХЕОЛОГИЮ И НАУЧНУЮ РЕСТАВРАЦИЮ В РОССИЙСКОЙ НАУКЕ

Археология – один из способов изучения истории человечества через вещественные памятники в широком смысле этого слова. В современной археологии четко прослеживается интеграция гуманитарной сферы через историю, музееведение с естественными науками и технологиями: от геологии и химии до ядерной физики и генетики. Всестороннее изучение объектов культурного наследия возможно только комплексно – и в гуманитарном аспекте, и с точки зрения их материальных свойств, которые исследуются естественно-научными методами.

За долгие годы археология прошла непростой путь в своем развитии, самоидентификации и определении основных целей и задач.

Термин археология возник в древней Греции и приписывается Платону. Древнеримский философ Тит Лукреций Кар – один из основоположников материалистического учения, в своем знаменитом трактате "О природе вещей" рассматривал историю развития человечества по эпохам, соответствующим материалу, из которого изготавливались орудия труда. Разделение Лукрецием древнейшей истории на каменный, медный, бронзовый и железный века, предложенное им еще в I веке до н.э., легло в основу современной периодизации дописьменной истории человечества [6].

Поначалу найденные древние артефакты воспринимались как диковинки, красивые вещи, которым иногда пытались вернуть их первоначальный облик. Мало кто задумывался об их исторической ценности, высокой значимости именно как материальных свидетелей прошлых веков. Однако увеличивающийся спрос на античные артефакты, их высокая стоимость стали побудительным мотивом для начала первых целенаправленных раскопок. С расширением археологических работ в начале XIX века и значительным увеличением количества найденных объектов культурного наследия начались единичные исследования материалов в составе обнаруженных

артефактов – керамики, металлов, пигментов. Самое первое документально подтвержденное химическое исследование состава нескольких греческих и римских монет проведено в Берлине в 1795 г. Мартином Генрихом Клапротом с помощью разработанного им гравиметрического анализа [7].

В России археология начала развиваться в XVIII веке, когда в русле петровских преобразований стали формироваться отечественная наука и образование. Необходимость систематизации и описания найденных археологических объектов в полной мере осознавал М.В. Ломоносов. В этом он был по сути дела пионером, ибо в его время археологии как самостоятельной науки еще не существовало. Согласно инструкции, составленной М.В. Ломоносовым, при проведении сбора сведений специальные экспедиции в разных областях России в числе прочих заданий должны были снимать планы и составлять описания "городов и знатных гор, или положений мест, примечания достойных" [8].

Во второй половине XVIII века Россия включается в орбиту формирующейся в Европе классической археологии, изучающей античные артефакты, тогда в основном еще с точки зрения искусствознания. Развитие классической археологии в России получает новый импульс с вхождением в состав империи Крыма с его богатейшим античным наследием.

После Отечественной войны 1812 г. в российском обществе наблюдается мощный всплеск патриотизма, национального самосознания, что оказывает влияние на все без исключения сферы жизни. История Отечества, национальная культура становятся крайне важной составляющей этих процессов. Это способствует возрождению интереса к "русской старине", ее древним храмам, памятникам, развитию археологических изысканий не только в Крыму и Причерноморье, но и по всей стране.

Важным шагом для дальнейшего развития археологических работ в России, их систематизации, просветительской деятельности становится создание в 1846 г. в Санкт-Петербурге Археологическо-нумизматического общества (с 1866 г. – Русское археологическое общество), в котором были сформированы три отдела: русской и славянской археологии, восточной археологии, а также древней и западной археологии. По этим направлениям российская археология развивалась вплоть до начала XX века.

На протяжении XIX столетия в России открывались новые музеи, в которых широкая публика приобщалась к истории страны через объекты культурного наследия различного рода. Прежде всего следует упомянуть Государственный исторический музей, который по праву можно назвать новаторским по своему подходу к освещению истории через материальные предметы различных эпох, начиная с первобытных стоянок на территории России и до XIX века.

С увеличением количества общедоступных музеев и ростом их коллекций все более важными становились вопросы реставрации артефактов различных эпох для их экспонирования. Это подразумевало целый комплекс работ, включающий в себя правильную очистку объекта, выявление повреждений, экспертизу подлинности и создание наиболее благоприятных условий для его сохранения и показа в музее.

В Европе в этот период уже развивались исследования объектов культурного наследия с помощью прежде всего химических методов, нацеленных на изучение состава красок и подбор оптимальных составов для очистки произведений искусства от загрязнений разного рода. Также очень востребованным в этом направлении оказалось, практически сразу после ее изобретения в 1827 г. Ж.Н. Ньепсом, свойство фотографии проникать сквозь верхние слои живописи. Крайне важным шагом для изучения внутренней структуры живописных произведений стало использование микроскопа. Новые методы позволяли углубленно изучать технологии, приемы, материалы, использовавшиеся живописцами прошлого, столь необходимые для проведения полноценной реставрации.

В России первопроходцем в применении естественно-научных методов в реставрации стал Эрмитаж, где уже в первой четверти XIX века была создана реставрационная мастерская с выделением "механической" и "художественной" части, также при ней основали школу. Именно здесь заложены первые традиции российской научной реставрации.

Императорская академия художеств – старейшее высшее художественное учреждение в России – в 1889 г. получила исключительное право на реставрацию древностей, найденных в ходе археологических раскопок на территории России [9]. В целом к середине XIX века в России были заложены основы научной реставрации. Однако, несмотря на растущий интерес к возможностям естественных наук, до их широкого, системного применения в реставрационной деятельности было еще далеко. Почти повсеместно превалировало так называемое поновление, т.е. восстановление предмета в виде, более или менее соответствующем представлениям о его первоначальном облике, а порой и вовсе ему не соответствующем [10].

Во второй половине XIX столетия в России началось бурное развитие естественных наук, что непосредственно повлияло и на формирование

нового направления в археологии. Речь идет о древнейшей истории человечества.

Развитие древнейшей археологии в России связано с именами российских биологов, геологов, зоологов второй половины XIX века. Для анализа своих археологических находок, прежде всего касающихся материальной культуры неолита и палеолита, все эти ученые активно использовали методы естественных наук.

Однако направление естественно-научного изучения археологических находок и его представители не воспринимались тогда в контексте развития археологии ни в России, ни в мире. Гуманитарное и естественно-научное сообщества в то время еще практически не пересекались, не имели общих площадок для обмена информацией, изданий. Многочисленные методологические и идеологические разногласия с обеих сторон не благоприятствовали их сближению.

К началу XX века реставрационная деятельность в России практически выделилась из археологии и примкнула к искусствоведению и музееведению. Развитие научной реставрации все в большей степени подразумевало широкое применение естественно-научных методов.

После революции 1917 г. нарождавшаяся советская наука и культура, невзирая на все трагические события и потери тех лет, породила целый ряд новаторских идей, произведений и форматов, зачастую намного опередивших свое время. Несмотря на тяжелое экономическое положение, разруху, прямую военную угрозу на внутренних и внешних фронтах, большевистское правительство понимало всю важность и срочность мер, связанных с развитием науки советской республики. Процессы слома старой системы и создания учреждений, институтов нового типа распространились и на гуманитарную сферу. Уже в 1919 г. В.И. Ленин подписал декрет Совета народных комиссаров о создании в Петрограде Российской академии по истории материальной культуры РАИМК[1]. Три ее отделения: этнологическое, археологическое и художественное, должны были заниматься, согласно Уставу Академии, всесторонним исследованием и сохранением памятников материальной культуры.

Также в 1919 г. в составе Академии был образован Институт археологической технологии (**ИАТ**). Он стал совершенно новаторским, причем не только для своего времени, научным учреждением, где успешно шли исследования объектов культурного наследия с использованием самых современных естественно-научных методов.

Идеологом создания и первым руководителем ИАТ стал знаменитый минералог, геохимик А.Е. Ферсман, который, по сути, олицетворял собой естественно-научное направление в деятельности института. Гуманитарную линию возглавил известный искусствовед, археолог М.В. Фармаковский, ставший ученым секретарем Института.

Основатели ИАТ так определяли принципы работы Института: “Физический метод в настоящее время побеждает, он подчинил себе даже химию, в ее области решая основные проблемы атома и его свойства, он совершенно преобразовал кристаллографию, он мощно врывается в астрономию, геологию и во весь цикл биологических дисциплин: перед всемогуществом физической методики, вооруженной математическим анализом, ничто не может устоять и сохранить устаревшие традиции работы.

Эти новые подходы пока не коснулись наук гуманитарных, и жизнь настойчиво требует ввести мысль историка или археолога в тот цикл научного мышления, который мы называем естественно-историческим миросозерцанием.”[2]

По сути, деятельность ИАТ основывалась на новой методологической парадигме – историко-технологическом подходе, где акцент делался именно на изучение процессов получения и обработки сырья, технологий производства, на материалы [11]. Соответственно, для этого комплекса исследований использовался целый спектр естественно-научных методов. Было выделено пять основных направлений исследований: камня, керамики и стекла, технологии красок и живописной техники, металла и органических останков.

Подобный новаторский по своим подходам научно-исследовательский Институт археологии и искусствознания был создан в этот период и в Москве.

Также в 1918 г. по инициативе И.Э. Грабаря создана Всероссийская Комиссия по сохранению и раскрытию памятников древней живописи. В ее работе сочетались основы принципиально нового подхода к реставрации: глубокий искусствоведческий анализ с исследованием артефактов естественно-научными методами.

Еще в январе 1917 г. в реставрационных мастерских Государственного Эрмитажа была организована химическая лаборатория, в которой разрабатывали передовые методы реставрации и консервации артефактов из различных материалов – от металлов до бумаги. В 1933 г. в Эрмитаже создана Лаборатория научной реставрации произведений прикладного искусства, которая в сотрудничестве с ИАТ развивала методики по реставрации особо сложных объектов из металла. В 1936 г. в Эрмитаже возник первый в стране му-

[1] С 1926 г. Государственная академия по истории материальной культуры ГАИМК.

[2] Известия Института археологической технологии / Под ред. Ферсмана, Фармаковского. Л., 1924. Вып. 2. С. 3.

зейный рентгенологический кабинет, где проводились предреставрационные исследования артефактов.

В последующие десятилетия именно особенности взаимодействия рентгеновского излучения с веществом – неразрушающий характер исследований, чувствительность к элементному составу и кристалличности/аморфности изучаемых объектов, возможность проводить трехмерную визуализацию внутреннего строения предметов, выявлять скрытые дефекты, предметы и особенности структуры на макро- или микроскопическом уровне – позволили рентгеновским и синхротронным методам исследований получить широкое применение в историческом материаловедении [12].

В 1930-е годы в СССР формируется новая система организации археологических работ, реставрации и охраны памятников. Возникают учреждения нового типа, соединяющие в работе с памятниками культуры гуманитарный и естественно-научный подходы. По мере развития естественных наук их методы начинают все более активно применяться в исследованиях объектов культурного наследия, в научной реставрации.

После Великой Отечественной войны, принесшей огромные потери, в том числе связанные с варварским уничтожением нацистами великого множества памятников культуры, внедрение естественно-научных методов в реставрацию начало развиваться ускоренными темпами.

Принципиально новый этап в развитии естественно-научных методов начинается в рамках атомного проекта, который дал импульс появлению большого числа новых технологий и методов исследований, в том числе активно востребованных в археологии и научной реставрации. В СССР эти методы начали активно внедряться Б.А. Колчиным в Институте археологии АН СССР, где в конце 1950-х годов по его инициативе начало развиваться направление по использованию естественно-научных методов в археологии. Такие исследования также успешно проводились в то время на кафедре археологии исторического факультета МГУ и в лаборатории археологической технологии в Институте археологии в Ленинграде под руководством С.И. Руденко.

Первое “Всесоюзное совещание по применению в археологии методов исследований естественных и технических наук” прошло в 1963 г. в Москве. Именно здесь впервые прозвучали основные тезисы, согласно которым “изучение археологических источников только с точки зрения морфологии, функционального назначения и типологии, т.е. методами классической археологии, без каких-либо объективных методов раскрытия физических, биологических и иных свойств вещей и их сочетаний, приводит к значительной потере исторической информации.”[3] Б.А. Колчиным выделены пять основных направлений взаимодействия археологии с естественными науками: 1) для полевой археологии – это поиск, разведка и изучение археологического памятника в поле (геофизика, аэрофотометрия и др.); 2) для изучения истории древнего производства – методы металлографии, петрографии, спектроскопии, рентгеноскопии, термического анализа, радиографии, химико-технического анализа, активационного анализа, изотопного анализа, остеологии, палеоботаники, пыльцевого анализа, карпологии; 3) абсолютная хронология требует методов датирования – радиоуглеродного, археомагнитного, дендрохронологического, термолюминесцентного; 4) решение проблемы “человек и биосфера” – палеоботаника, палеогеография; 5) применение математических средств и методов во всех звеньях научных исследований археолога [13].

В этот период и естественно-научное, и гуманитарное сообщества в СССР все больше осознают перспективы и важность сближения методов исследований [14]. Так же, как в археологии, эти тенденции развивались в 1950–1980 гг. в научной реставрации, результатом чего стало создание научно-реставрационной производственной мастерской в Ленинграде, Центральной научно-реставрационной мастерской и Всесоюзной центральной научно-исследовательской лаборатории по консервации и реставрации музейных художественных ценностей в Москве. Продолжало расширяться применение естественно-научных методов в Центральной художественно-реставрационной мастерской им. академика И.Э. Грабаря.

Речь идет именно о научном исследовании объектов реставрационных работ, каждый из этапов которого имеет свои нюансы. Перед началом работ необходимо, в первую очередь, детально изучить артефакт, буквально послойно увидеть его структуру, чтобы точно определить, какие материалы использовались при его создании, как менялись их качества в дальнейшем. Углубленная информация о материале исследуемого объекта, включая его состав, структуру и свойства, позволяет реставратору прежде всего сделать выводы о степени сохранности объекта, определить скрытые дефекты, технику работы мастера при создании артефакта, выработать оптимальные методы для последующей реставрации и экспонирования объекта. Такой комплекс исследований важен и для датировки произведения, уточнения авторства, определения его подлинности.

[3] *Колчин Б.А.* Физико-математические методы в археологии // Новое в применении физико-математических методов в археологии. М.: Наука, ГРВЛ, 1979. С. 4.

Применительно к живописи наиболее востребованы сегодня такие взаимодополняющие методы, как исследование картины в УФ- и ИК-лучах, определенные виды фотографии и рентгенографии, микрохимический анализ. Этими методами определяются химический состав материалов, использующихся в живописи (пигменты, лаки), а также структура минералов, тканей, кожи, бумаги и др. Соответственно, в этих случаях исследования проводят с помощью различных видов рентгеновских установок и микроскопов, УФ- и ИК-спектрографов [15].

В целом можно сказать, что в 1950–1980 гг. естественно-научные методы оказались более востребованы именно в научной реставрации, так как они показали высокую эффективность в практических работах в этой области.

Однако, несмотря на активизацию применения естественно-научных методов в научной реставрации и археологии в нашей стране, их окончательного объединения в отдельное направление не произошло. Распад СССР, стагнация в науке в 1990-е гг. сильно затормозили развитие исторического материаловедения. За рубежом, напротив, в последние десятилетия XX века началось активное расширение исследований в этой области. В том числе это было связано с расширением спектра и возможностей материаловедческих методов исследований на больших (мега) установках (ускорителях, источниках синхротронного и нейтронного излучения) в изучении объектов культурного наследия.

В России позитивные изменения по активизации сотрудничества гуманитариев и институтов естественно-научного профиля в рамках совместных проектов разработки комплексного подхода к исследованию объектов культурного наследия начались с середины 2000-х гг. Здесь необходимо отметить позитивную роль Российского фонда фундаментальных исследований, Российского научного фонда, Министерства науки и высшего образования, где успешно прошел целый ряд междисциплинарных конкурсов, ориентированных, в том числе, на применение естественно-научных методов в историческом материаловедении. В связи с тем, что в рамках совместных проектов работали научные коллективы со всей страны, из различных музеев, институтов гуманитарного и естественно-научного профиля, постепенно удалось сформировать комплексный подход к исследованию объектов культурного наследия, общие научные задачи и алгоритмы работы. Все это способствовало росту востребованности исследований культурного наследия в сотрудничестве гуманитариев с естественно-научными институтами и лабораториями, возникновению междисциплинарной среды в области исторического материаловедения внутри российского научного сообщества.

В настоящее время в России исследования в области исторического материаловедения развиваются как в гуманитарных учреждениях, музеях, университетах, так и в институтах естественно-научного профиля.

Новое междисциплинарное направление историческое материаловедение начало развиваться по инициативе М.В. Ковальчука в Национальном исследовательском центре “Курчатовский институт” с 2016 г. [16]. Это стало возможным благодаря уникальным компетенциям Курчатовского института в области материаловедческих исследований, связанных прежде всего с различными направлениями атомного проекта и новейшим развитием нано-, био-, информационных, когнитивных и социогуманитарных технологий. В их рамках заметную роль в последние годы начало играть историческое материаловедение. Для его развития была создана Лаборатория естественно-научных методов в гуманитарных науках.

Исследования развернулись в сотрудничестве с Институтом археологии РАН, Государственным историческим музеем, Государственным музеем изобразительных искусств имени А.С. Пушкина, Российской национальной библиотекой, Институтом археологии Крыма и другими гуманитарными учреждениями России.

На основании анализа ключевых результатов циклов исследований объектов культурного наследия различной природы, выполненных на экспериментальной базе НИЦ “Курчатовский институт”, на базе выявленных закономерностей была выработана методология исследований применительно к каждой из групп материалов и объектов и получены новые результаты, недостижимые ранее с применением только методов сравнительно-исторического анализа. В рамках проведенных работ решались самые различные задачи и определялись оптимальные методы исследований.

НАИБОЛЕЕ ВОСТРЕБОВАННЫЕ ЕСТЕСТВЕННО-НАУЧНЫЕ МЕТОДЫ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ОБЪЕКТОВ КУЛЬТУРНОГО НАСЛЕДИЯ РАЗНОЙ ПРИРОДЫ И ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Выбор исследовательских методов в изучении объектов культурного наследия определяется материалом изучаемых предметов, их сохранностью и научными задачами, сформулированными совместно представителями естественно-научного профиля и гуманитариями.

По опыту комплексных работ, проведенных в Лаборатории естественно-научных методов в гуманитарных науках НИЦ “Курчатовский институт”, наиболее востребованными в ходе исследований являются взаимодополняющие методики синхротронной и нейтронной диагностики, электронная микроскопия и элементный микроана-

лиз, газовая хроматография (**ГХ**) и масс-спектрометрия (**МС**), компьютерная томография (**КТ**), 3D-сканирование и моделирование. Каждый из методов имеет свои преимущества и недостатки, но путем комбинации таких комплементарных методов возможно получить детальную информацию практически о любом материале и объекте. В ходе исследований в НИЦ "Курчатовский институт" проводилось условное разделение материалов на три большие группы: металлы, органические и неорганические материалы.

Особенности взаимодействия рентгеновского излучения с веществом – неразрушающий характер исследований, чувствительность к элементному составу и аморфности изучаемых объектов – позволяют получать детальную информацию об их структуре и составе, проводить трехмерную визуализацию внутреннего строения объектов, выявлять скрытые дефекты и особенности структуры на макро- или микроскопическом уровне. Применительно к вопросам сохранности музейных объектов это дает возможность увидеть и изучить происходящие в них скрытые процессы деградации, понять причины и определить варианты решения проблемы.

В связи с этим широко применяется метод рентгеновской томографии. Эффективным методом анализа для определения элементного состава сложных многокомпонентных объектов является рентгенофлуоресцентный анализ. Для исследования материалов, имеющих кристаллическую структуру: керамика, минералы, иногда металл, весьма результативен рентгенофазовый анализ (**РФА**).

На сегодня наиболее универсальным аналитическим методом, который позволяет получать детальные сведения одновременно о природе, составе, структуре, происхождении материала и технике изготовления исследуемого объекта, являются взаимодополняющие синхротронно-нейтронные исследования. Свойства нейтронного излучения особенно востребованы в исследованиях сложных объектов культурного наследия, сочетающих в себе неорганические и органические элементы.

Еще одним актуальным в историческом материаловедении методом является электронная микроскопия, которая в сочетании с микроанализом позволяет исследовать широкий спектр органических (дерево, краски, бумага, пергамен) и неорганических (металлы, минералы) материалов, а также более сложные артефакты, в которых эти материалы сочетаются [17].

Все органические компоненты в археологических объектах представляют собой сложные смеси. Со временем из-за распада органических веществ эта сложность возрастает, поэтому для идентификации молекулярных структур в таких смесях чрезвычайно актуальными являются хроматографические и масс-спектрометрические методы анализа. Эти методы очень информативны при исследовании состава остатков пищи, напитков, масел, смол, бальзамов, красок, лаков, определении породы древесины, идентификации растительных и животных останков. Методы хромато-масс-спектрометрии позволяют также определять состав тканей (лен, хлопок, шелк, шерсть и пр.), породу дерева, а в некоторых случаях и место его произрастания. Несмотря на то что все методы хроматографии являются разрушающими, для проведения анализа необходим очень малый объем образца – порядка нескольких миллиграммов [18].

Из хорошо зарекомендовавших себя в исследованиях объектов культурного наследия методов также необходимо упомянуть масс-спектрометрию с индуктивно связанной плазмой (**МС-ИСП**) и атомно-эмиссионную спектроскопию. С их помощью определяется с очень высокой чувствительностью микро- и следовой примесный состав материала, а также изотопный состав образцов, что востребовано для определения элементного состава образцов в различных областях – от геологии до объектов культурного наследия [19].

НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕРЫ РАБОТ В ОБЛАСТИ ИСТОРИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ В НИЦ "КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ"

Одним из первых исследований Лаборатории естественно-научных методов в гуманитарных науках НИЦ "Курчатовский институт" стало изучение скульптур эпохи Возрождения (Иоанн Креститель и танцующий Амур) из коллекции ГМИИ им. А.С. Пушкина. В результате этой работы были определены состав металла и состояние артефактов, благодаря чему удалось подтвердить авторство Д. Донателло для одной из скульптур и дать рекомендации по их дальнейшей реставрации. Методами растровой электронной микроскопии (**РЭМ**) совместно с энергодисперсионным рентгеновским микроанализом (**ЭРМ**) изучено количественное содержание и распределение химических элементов в составе вещества. Для исследования фазового состава использовался метод РФА на станции "Белок" "КИСИ-Курчатов". Нейтронные радиографические и томографические исследования внутреннего строения статуй проводились на реакторе ИР-8. Проведенное комплексное исследование естественно-научными методами этих артефактов эпохи Возрождения позволило разработать оптимальную программу реставрации, включая технологии очистки поверхности статуй, их консервацию и дальнейшее экспонирование. Сегодня скульптура Иоанна Крестителя вновь доступна для специалистов и посетителей ГМИИ им. А.С. Пушкина [20].

В сотрудничестве со специалистами Института археологии РАН также исследовались матери-

Рис. 1. Фото и томограммы креста-энколпиона и вложения в нем (Новгород, раскоп Власьевский-2): *1* – фото до раскрытия и с приоткрытыми створками; *2* – 3D-модель и нейтронный срез после цветовой графической обработки. Темным цветом выделены окисленные участки внутренней части створок [24].

алы и технологии чернения крестов-энколпионов XII–XIII веков из Суздальского Ополья. Состав металла определен методами РЭМ с рентгеновским микроанализом и рентгенофлуоресцентного анализа как многокомпонентная бронза с примесями олова, свинца и цинка. Также определен состав черни креста, который представлял собой сульфид меди с включениями свинца, по всей видимости, добавленного мастерами для снижения температуры плавления черневой массы. Версия, что при декорировании створок изначально использовалась именно техника вставок, также была проверена с помощью нейтронной и синхротронной томографии, когда на томографических срезах стало видно значительное возвышение декора над поверхностью створки. Это дало новую информацию о схожести технологий чернения древнерусских мастеров с аналогами из Византии и Европы.

Также неразрушающими методами определены внутренние вложения в мощевики. В результате проведенной рентгеновской и нейтронной визуализации внутренней полости объекта удалось установить месторасположение и форму фрагментов содержимого. Была отработана методика применения взаимодополняющих возможностей томографии на разных типах излучения в сочетании с данными элементного анализа применительно к сложным многокомпонентным объектам культурного наследия. Исследование содержимого мощевиков методами ГХ и газовой хроматографии с масс-спектрометрией (**ГХ-МС**) показало, что в качестве вложений в энколпионах присутствуют частицы дерева и смолы, воска и ладана, фрагменты льняного, шелкового, конопляного волокна и неизвестного травянистого растения (рис. 1). Эта важная информация дополнила очень скудные сведения о роде реликвий и их почитании в домонгольской Руси [21–24].

Важные результаты дал многокомпонентный комплекс повторных исследований современными естественно-научными методами известных артефактов из старых коллекций Государственного исторического музея. Он включал в себя определение путем сопоставления нескольких объектов из захоронений одного периода состава “покрытия” наконечника медного копья IV тысячелетия до н.э. и изучение механизма его формирования на изделии. Результаты, полученные с помощью РЭМ, показали, что основным металлом наконечника копья был медно-мышьяковый сплав. С помощью РФА пробы его “покрытия” выявлено, что наконечник покрыт преимущественно слоем сульфида меди – халькозином, по своему составу и структуре полностью аналогичным природному минералу. Это позволило предположить естественный характер “покрытия” на наконечнике копья, связанный со специфическими особенностями анаэробной атмосферы в погребальной камере.

Кроме того, методами рентгенофлуоресцентного анализа и ЭРМ, а также МС и МС-ИСП был исследован способ золочения уникальной фигурки “идола” из кремационного погребения Черная могила X века. В ходе работы, а также при сопоставлении с объектами из аналогичных погребений этого времени была подтверждена версия об изначальном амальгамировании фигурки, а отсутствие ртути в приповерхностном слое объяснилось ее испарением при высоких температурах в погребальном костре.

Приведенные выше примеры хорошо демонстрируют важность комплексного подхода к исследованию археологических объектов, когда сравнение полученных результатов и анализ условий их захоронения в единой логической цепочке позволяют реконструировать особенности древней технологии.

В рамках изучения на новом уровне уникальных артефактов из Черной могилы – известнейшего памятника дохристианской Руси X века – из спекшегося в погребальном костре конгломерата были исследованы шлем, фрагменты наконечника копья и стрелы, меча. Это стало возможно при помощи целого комплекса неразрушающих методов визуализации, включавших в себя рентгенов-

скую КТ, синхротронную радиографию и томографию на источнике синхротронного излучения "КИСИ-Курчатов", нейтронную томографию на исследовательском реакторе ИР-8.

Рентгеновская и нейтронная томография являются взаимодополняющими методами, так как в связи с разными механизмами взаимодействия этих излучений с веществом в итоге получается наиболее полная картина. Это еще раз доказало данное исследование, так как по его результатам удалось определить линию слома на объектах, реставрационные вмешательства, трещины, участки коррозии, технологические детали изготовления, увидеть в деталях орнамент, выявить клеймо на обеих сторонах лезвия меча.

Выяснилось, что в ходе прежней реставрации ряд объектов был соединен из различных, не принадлежавших им фрагментов. Дальнейшее исследование фрагмента наконечника копья, также составленного при реставрации из фрагментов разных объектов, показало особенности геометрического орнамента на втулке, что позволило уточнить его атрибуцию. С помощью такого же комплекса взаимодополняющих методов выявлен орнамент наконечника стрелы, что дало возможность атрибутировать его происхождение от кочевников юга Восточной Европы.

Таким образом, благодаря применению комплекса естественно-научных и, что особенно важно для хрупких предметов, пострадавших в огне, неразрушающих методов стало возможным детально изучить целый ряд артефактов из уникального памятника Руси X века. Даже при работе с такими сложными объектами, часть из которых считались безвозвратно утраченными, удалось выявить особенности их внешнего вида, декора, состояния, уточнить технологии их изготовления, степень сохранности, более точно их атрибутировать [25, 26].

В рамках развития работ по историческому материаловедению в НИЦ "Курчатовский институт" также исследована большая группа органических объектов, включающая в себя продукты жизнедеятельности человека и животных, остатки растений, сохранившихся в археологических памятниках главным образом в виде семян и древесных тканей. В процессе этих исследований изучались и единичные объекты, например сложносоставное изделие из могильника Березовый рог II тыс. до н.э., инкрустированное семенами воробейника полевого. По итогам исследований этот интересный объект состоял из короба из бересты, обтянутого шерстяной тканью, обмазанного сверху слоем жидкой глины и животного жира, на который нанесли орнамент из семян воробейника полевого [27].

Также исследован образец ладана, найденного в усадьбе в древнем центре Владимира, погибшей при взятии города войском Батыя в 1238 г. Объекты, обнаруженные в усадьбе, уже изучались естественно-научными методами в конце 1990-х – начале 2000-х гг. Новое исследование с помощью метода ГХ-МС позволило уточнить, что образец представляет собой воскомастику – смесь остатков ладана, подвергшегося сильному термическому воздействию в кадильнице во время богослужения, и пчелиного воска [28].

Кроме того, проведен цикл исследований по установлению содержимого различных сосудов. Определение их функции дает важную информацию о повседневной жизни, торговле, погребальных обычаях и пище наших предков. Оптимальными методами в этих исследованиях являются ГХ и МС. Именно с их помощью удалось идентифицировать черный налет со стенок сфероконического средневекового сосуда из города Болгар как остатки живичной смолы хвойного дерева, подвергавшейся нагреву, и таким образом определить функцию сосуда как дистилляционный аппарат – "аламбик" для перегонки живицы.

Теми же методами определено содержимое шести глиняных сосудов XI века из Суздальского Ополья как жир различных одомашненных животных. Кроме того, удалось уточнить атрибуцию среднеазиатского глиняного сосуда из Хивинского ханства как вместилища молочного жира из верблюжьего молока. В то же время анализ остатков пищи из глиняных сосудов бронзового века, найденных в Ярославской и Рязанской областях, определил в них янтарную кислоту, что послужило доказательством их использования для приготовления пищи из рыбных продуктов, что встречается в археологических памятниках достаточно редко [29–31].

В ходе проведенных исследований хорошо зарекомендовал себя анализ пород древесины с помощью ИК-спектроскопии в разработке неразрушающей методики идентификации пород археологической древесины. Успешные результаты получены при сравнительном исследовании нескольких десятков образцов древесины хвойных и лиственных пород деревьев средней полосы России [32].

Еще один комплекс исследований охватывает различные аспекты изучения письменных источников – с точки зрения писчего материала, чернил. Так, с использованием электромагнитного излучения различных спектральных диапазонов и электронной микроскопии подтверждена первоначальная гипотеза, что буквы на средневековой новгородской берестяной грамоте второй четверти XV века были написаны сажевыми чернилами, гусиным пером, что делает этот объект уникальным в своем роде.

Также на берестяной грамоте, относящейся ко второй половине XIV века, был определен элементный состав и проведено элементное картирование участков поверхности как с нанесенны-

ми на нее буквами, так и вне текста. В результате возникла гипотеза о естественном механизме окрашивания букв на этой берестяной грамоте, происходившем в результате вдавления в бересту острия писала, в ходе чего разрушалась суберинова структура межклеточных стенок пробкового слоя бересты и происходило самоокрашивание. Эта версия подтверждена экспериментально на тестовых образцах бересты [33].

Анализ состава красных восковых вислых печатей с русских документов периода конца XV–первой половины XVIII веков проводился с помощью комплекса методов: ИК-спектроскопия, растровая электронная микроскопия с ЭРМ, РФА, МС-ИСП и ГХ-МС, что позволило исследовать и неорганические, и органические компоненты печатей. Таким образом были выявлены характерные черты эволюции их рецептур в русской практике с заметными отличиями от европейских аналогов [34].

Исследования различных пигментов естественно-научными методами – одни из самых востребованных в рамках исторического материаловедения. В сотрудничестве с Институтом археологии РАН изучены образцы пигментов и горных пород с могильных плит из трех погребальных комплексов каракольской культуры на Алтае, относящиеся к началу II тыс. до н.э. – эпохе ранней бронзы. С использованием методов электронной микроскопии с рентгеновским микроанализом, а также порошковой рентгеновской дифракции установлено, что для получения красного цвета древние художники использовали разные оттенки охры с содержанием гематита, а для рисунков черным цветом они применяли сажу [35, 36].

Еще одной из знаковых работ в цикле нового этапа исследований известных археологических памятников с применением комплекса современных аналитических методов стало повторное изучение состава материала топоров и наверший булав из Бородинского клада (XVIII–XVII века до н.э.), хранящегося в Государственном историческом музее, которые при исследованиях в 1980-е гг. были идентифицированы как нефрит и мыльный камень.

Исследования фазового состава артефактов Бородинского клада и сопоставительной выборки артефактов того же периода проводились на станциях “Белок”, “Рентгеноструктурный анализ” и “Структурное материаловедение” синхротронного источника “КИСИ-Курчатов”. Для анализа элементного состава и микроструктурных особенностей морфологии поверхности образцов использовалась сканирующая электронная микроскопия с ЭРМ. В качестве дополнительного метода изучения химического состава минеральной основы каменных артефактов также применялась ИК-спектроскопия.

По итогам исследований удалось уточнить, что два топора изготовлены из серпентинита, а три – из жадеита. Также новыми были результаты исследований наверший булав, основной фазой материала которых оказался антигорит – один из минералов группы серпентинита.

Таким образом, эти исследования, кроме новых выводов о природе материала артефактов, еще раз подтвердили недостаточность только одного аналитического метода для идентификации минералов и горных пород, применявшегося при более ранних исследованиях. Скорее всего при повторном исследовании многих подобных объектов культурного наследия с применением комплекса современных материаловедческих методов могут быть сделаны новые выводы и открытия [37].

Таким же ярким примером комплексного подхода в историческом материаловедении стало изучение античной скульптурной терракоты V в. до н.э., найденной экспедицией Института археологии РАН при подводных раскопках в г. Керчь. С помощью комплекса аналитических методов – оптической и растровой электронной микроскопии, ЭРМ, рентгеновской дифракции и ИК-спектроскопии, – реконструирована первоначальная раскраска терракоты и установлен состав палитры древних художников. На внутренней части скульптуры обнаружены следы, предположительно, свинцовых наплывов.

На втором этапе исследований изучались технологии изготовления терракоты. С помощью нейтронной и рентгеновской томографии в глиняном тесте обнаружилось множество пустот. По их форме и расположению, а также технологическим швам в местах соединения частей глины, соответствующим контуру рельефных черт лица, был сделан вывод о том, что это скульптурная терракота (рис. 2).

Завершающим этапом этого многокомпонентного изучения античной терракотовой головы стало исследование происхождения свинца с ее внутренней поверхности. Для идентификации рудного источника проведен анализ соотношений стабильных изотопов свинцового наплыва и более подробно изучен его элементный состав. По итогам исследования сделан вывод о предположительной локализации района добычи изученного свинца в Аттике (Греция, Лаврионские рудники). На данный момент это один из самых ранних зафиксированных случаев оборота этого металла между Афинами и Боспорским государством [38–40].

Особо выделяется в цикле работ в области исторического материаловедения, проведенных в НИЦ “Курчатовский институт”, междисциплинарное исследование десяти древнеегипетских мумий, в котором наиболее ярко представлена интеграция естественно-научного и гуманитарного знания. При проведении этого исследования

Рис. 2. Томографические (КТ) профильные срезы, демонстрирующие технологические швы: а – в глиняном тесте бороды; линиями отмечены точки измерения ширины технологических швов: *1* – 1.3, *2* – 1.7, *3* – 2.4, *4* – 1.8, *5* – 2.7, *6* – 1.3 мм; б – фронтальный и боковые виды изделия; в – профиль губ, технологические швы указаны стрелками [39].

основной целью было решение комплексными естественно-научными, недеструктивными методами фундаментальной научной проблемы изучения египетских мумий как одного из уникальных исторических источников. Их всестороннее исследование в рамках междисциплинарного подхода дает ценную информацию о жизни и здоровье людей, технике и особенностях мумификации, о развитии культуры и медицины в Древнем Египте. Такой синергетический подход позволил впервые в отечественной науке провести всестороннее изучение мумий с применением комплекса естественно-научных и исторических методов исследования, усовершенствовать уже разработанные методы и предложить новые пути извлечения “скрытой” информации.

Исследование включало в себя комплекс методов: КТ, антропологический, медицинский и криминалистический анализ, ГХ-МС, электронную микроскопию, генетический и изотопный анализ, аддитивные технологии для создания моделей исследуемых объектов [41].

Отправной точкой для всего комплекса исследований стало проведение рентгеновской КТ первого экземпляра из коллекции мумий (рис. 3). Таким образом, была отработана методика исследований для следующего этапа при проведении томографии всех остальных целых объектов, а также нескольких голов и мумий животных из коллекции ГМИИ им. А.С. Пушкина: большой кошки, сокола, ибиса, крокодила, котенка, собаки и конгломерата змей.

На основании обработанных и проанализированных рентгеновских компьютерных томограмм определены точные антропологические характеристики, уточнены пол, возраст умерших, имеющиеся патологии и повреждения, наличие внутренних органов и инородных предметов внутри тел. Согласно итогам из десяти исследуемых мумий пять были женщинами и пять – мужчинами. В возрасте до 35 лет умерло пять человек, трое – в диапазоне от 35 до 60 лет, и две женщины скончались в возрасте от 50 до 75 лет. В трех случаях половая принадлежность мумий отличалась от музейных данных, базирующихся на надписях на саркофаге [42].

Также исследованы бальзамирующие составы тела и волос, подтвержден тип ткани для бинтования, проведены генетический и изотопный анализы ряда мумий.

Разработан способ географической идентификации битума в бальзамирующих смолах по относительному содержанию ванадия, никеля и молибдена [43].

Дополнительно проведено комплексное исследование покрытия волос голов трех мумий методами оптической микроскопии, ИК-спектроскопии, ГХ и МС. По его итогам установлено, что при мумификации в Древнем Египте для покрытия волос использовали специальные бальзамирующие составы, отличающиеся от рецептур для бальзамирования тел [44].

Впервые в России было проведено генетическое исследование мумий. Прежде всего оно подтвердило данные краниометрического анализа по

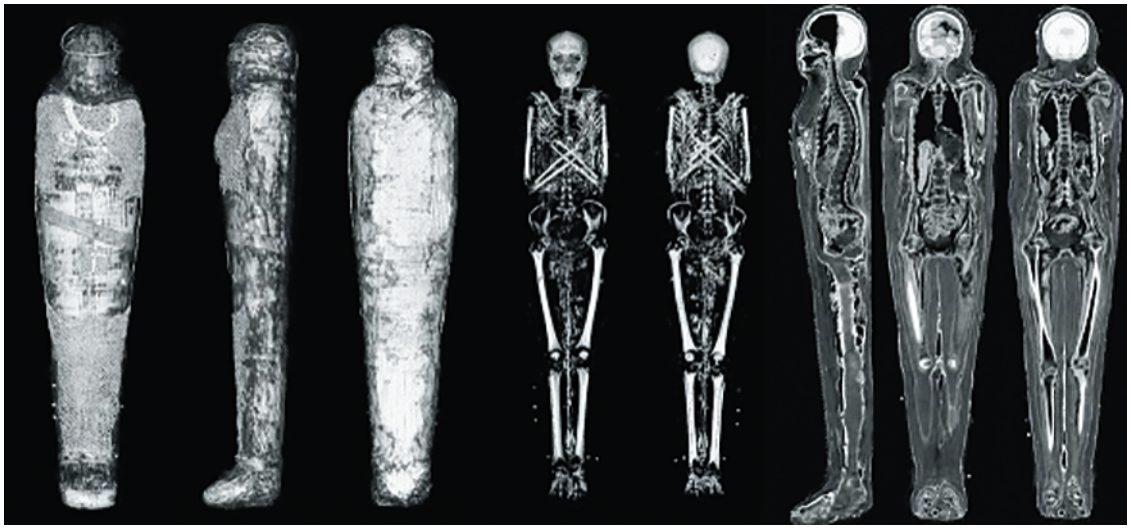


Рис. 3. Реконструкция тела мумии женщины из саркофага Хор-Ха (I,1a 5301) [41].

определению средиземноморского антропологического типа и пола. Также впервые в отечественной науке удалось исследовать ДНК мумий на наличие заболеваний, в ходе исследования выделены патогены сыпного тифа и газовой гангрены [45].

Успешное проведение сложной процедуры выделения ДНК стало возможным, так как на основании изображений КТ был разработан методический подход к изъятию образцов с высоким содержанием эндогенного ДНК, рассчитано количество костного порошка, получаемого из объектов разных размеров. Таким образом, удалось не только отобрать образцы наименее разрушающим способом, рассчитав глубину проникновения для забора материала, но и заранее рассчитать точки, где шансы на дальнейшее успешное секвенирование ДНК наиболее высоки. Это имеет важное практическое значение для дальнейших подобных исследований.

Также на основе данных КТ получена углубленная информация об особенностях внутренней структуры одной из мумий, технике ее бальзамирования и ритуального декора, что позволило в сочетании с историко-искусствоведческим методами уточнить ее датировку – вторая половина I века н.э. – и происхождение из некрополя Хавары.

Это первая подобная работа для отечественной науки, а возможности КТ для изучения прически и декоративных картонажных элементов мумии практически не описаны и в зарубежной литературе. Результаты исследования, несомненно, доказывают перспективность дальнейшего использования метода КТ для неинвазивных исследований целого ряда объектов культурного наследия, включая такие сложные, как мумии [46].

Завершающим этапом в междисциплинарном исследовании древнеегипетских мумий стала реконструкция внешности. Использование результатов КТ как референсов и вспомогательных 3D-моделей при работе над реконструкцией позволило применить комбинированный подход к реконструкции в сочетании с методом М.М. Герасимова. Результаты совместного исследования были представлены на выставке в ГМИИ им. А.С. Пушкина “Мумии Древнего Египта. Искусство бессмертия” с 1 марта по 31 мая 2022 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Формирование нового междисциплинарного направления – исторического материаловедения – взаимосвязано с общими тенденциями интеграции естественных и гуманитарных наук на современном этапе расширения междисциплинарности.

Синергетический подход с применением комплекса естественно-научных и исторических методов исследования позволяет усовершенствовать уже разработанные подходы, предложить новые пути извлечения “скрытой” информации из различных типов материальных источников, ввести в научный оборот значительный объем новой исторической информации, повысить достоверность атрибуции исследуемых объектов.

В ходе исследований, проведенных в Лаборатории естественно-научных методов в гуманитарных исследованиях НИЦ “Курчатовский институт”, получен целый ряд новых исторических данных, уточнены и перепроверены выводы исследований прежних лет. Полученные результаты еще раз подтвердили крайнюю важность и необходимость комплексного подхода, единого алгоритма действий по анализу объектов и интерпретации полученных данных со стороны представителей как естественно-научного, так и гуманитарного сообщества.

Анализ развития исторического материаловедения позволяет сделать вывод о несомненной

перспективности дальнейшего совершенствования естественно-научных методов для изучения объектов культурного наследия, значимости исторического материаловедения для российской науки и культуры, высокой степени просветительского потенциала и привлекательности итогов работ в этой сфере для популяризации науки среди самых широких кругов населения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гайденко П.П.* Эволюция понятия науки. М.: Наука, 1980. 568 с.
2. *Шредингер Э.* Природа и греки. Ижевск, 2001. 81 с.
3. *Винер Н.* Кибернетика и общество. М.: Изд-во иностранной литературы, 1958. 200 с.
4. *Вернадский В.И.* // Собрание сочинений: в 24 т. М.: Наука, 2013. Т. 10. С. 95.
5. *Вернадский В.И.:* pro et contra: Антология литературы о В.И. Вернадском за 100 лет (1898–1998). СПб., 2000. 871 с.
6. *Лукреций* О природе вещей. М.: Художественная литература, 1983. 383 с.
7. *Pollard M., Batt C., Stern B., Young S.M.M.* // Analytical Chemistry in Archaeology. Manuals in Archaeology. Cambridge, 2011. P. 6.
8. *Гурвич Д.М.* // Краткие сообщения Института истории материальной культуры. М., 1957. Т. 16. С. 119.
9. *Бобров Ю.Г.* // От мастерской к кафедре реставрации живописи. Фотохроника. 1971–2017. Альбом. СПб., 2017. С. 4.
10. *Зверев В.В.* // От поновления к научной реставрации. М.: ГосНИИР, 1999. С. 91.
11. Известия Института археологической технологии. Вып. I. Пб: Гос. изд-во, 1922. 194 с.
12. *Ковальчук М.В., Яцишина Е.Б., Благов А.Е. и др.* // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 5. С. 681.
13. *Колчин Б.А.* Физико-математические методы в археологии // Новое в применении физико-математических методов в археологии. М.: Наука, ГРВЛ, 1979. 124 с.
14. *Ваганов П.А.* Физики дописывают историю / Под ред. Шера Я.А. Л.: Изд-во ЛГУ, 1984. 215 с.
15. *Косолапов А.И.* Естественно-научные методы в экспертизе произведений искусства. СПб.: Изд-во Гос. Эрмитажа, 2010. 170 с.
16. Естественно-научные методы в гуманитарных науках: совещание-семинар [13 марта 2015 г., г. Москва] / НИЦ “Курчатовский институт”; Государственный исторический музей. М., 2015. 104 с.
17. *Васильев А.Л., Ковальчук М.В., Яцишина Е.Б.* // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 6. С. 845.
18. *Пожидаев В.М., Сергеева Я.Э., Слушная И.С. и др.* // Бутлеровские сообщения. 2017. Т. 52. № 12. С. 73.
19. *Поташева И.М., Светов С.А.* // Труды Карельского научного центра РАН. 2013. № 4. С. 136.
20. *Глазков В.П., Коваленко Е.С., Мурашев М.М. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 4. С. 670.
21. *Колобылина Н.Н., Грешников Э.А., Васильев А.Л. и др.* // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 4. С. 543.
22. *Зайцева И.Е., Грешников Э.А., Велигжанин А.А. и др.* // Российская археология. 2019. № 3. С. 50.
23. *Говор Л.И., Грешников Э.А., Зайцева И.Е. и др.* // Краткие сообщения Института археологии. 2017. № 249-II. С. 348.
24. *Коваленко Е.С., Подурец К.М., Грешников Э.А. и др.* // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 5. С. 826.
25. *Каинов С.Ю., Коваленко Е.С., Подурец К.М. и др.* // Российская археология. 2021. № 2. С. 55.
26. *Коваленко Е.С., Подурец К.М., Мурашев М.М. и др.* // Российские нанотехнологии. 2020. Т. 15. № 5. С. 56.
27. *Азаров Е.С., Пожидаев В.М., Шишлина Н.И. и др.* // Краткие сообщения Института археологии. 2016. № 244. С. 391.
28. *Пожидаев В.М., Зайцева И.Е., Камаев А.В. и др.* // Российские нанотехнологии. 2020. Т. 15. № 5. С. 128.
29. *Pozhidaev V., Kamaev A., Kovalchuk M. et al.* // Archaeometry. 2017. V. 59. № 6. P. 1095.
30. *Пожидаев В.М., Зайцева И.Е., Камаев А.В. и др.* // Краткие сообщения Института археологии. 2016. № 245-II. С. 226.
31. *Пожидаев В.М., Сергеева Я.Э., Слушная И.С. и др.* // Бутлеровские сообщения. 2017. Т. 52. № 12. С. 73.
32. *Пожидаев В.М., Ретивов В.М., Панарина Е.И. и др.* // Журн. аналит. химии. 2019. Т. 74. № 12. С. 911.
33. *Созонтов Е.А., Преснякова Н.Н., Пахунов А.С. и др.* // 7-я Европейская конференция по рассеянию нейтронов: тезисы микросимпозиумов (1–4 июля 2019 г.). СПб., 2019. С. 96.
34. *Носова Е.И., Вебер Д.И., Проскурякова М.Е. и др.* // Российские нанотехнологии. 2020. Т. 15. № 5. С. 40.
35. *Пахунов А.С., Дэвлет Е.Г., Каратеев И.А. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 6. С. 984.
36. *Пахунов А.С., Дэвлет Е.Г., Молодин В.И. и др.* // Археология, этнография и антропология Евразии. 2017. Т. 45. № 3. С. 56.
37. *Калинин П.И., Велигжанин А.А., Колобылина Н.Н. и др.* // Труды Государственного исторического музея. 2019. Выпуск XXX. С. 40.
38. *Грешников Э.А., Анциферова А.А., Дороватовский П.В. и др.* // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 6. С. 999.
39. *Ковальчук М.В., Яцишина Е.Б., Макаров Н.А. и др.* // Кристаллография. 2020. Т. 65. № 5. С. 832.
40. *Кашкаров П.К., Ковальчук М.В., Макаров Н.А. и др.* // Кристаллография. 2021. Т. 66. № 1. С. 159.
41. *Яцишина Е.Б., Ковальчук М.В., Лошак М.Д. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 3. С. 479.
42. *Яцишина Е.Б., Васильев С.В., Боруцкая С.Б. и др.* // Археология, этнография и антропология Евразии. 2019. Т. 47. № 3. С. 136.
43. *Яцишина Е.Б., Пожидаев В.М., Сергеева Я.Э. и др.* // Тонкие химические технологии. 2019. Т. 14. № 4. С. 45.
44. *Яцишина Е.Б., Пожидаев В.М., Сергеева Я.Э. и др.* // Журн. аналит. химии. 2020. Т. 75. № 2. С. 171.
45. *Яцишина Е.Б., Булыгина Е.С., Васильев С.В. И др.* // Российские нанотехнологии. 2020. Т. 15. № 5. С. 2.
46. *Яцишина Е.Б., Васильев С.В., Васильева О.А. и др.* // Кристаллография. 2020. Т. 65. № 6. С. 975.

EDN: MRUOIR
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 831–849

УДК 535.4; 537.531; 539.26

САМООРГАНИЗАЦИЯ БЕЛКОВЫХ МОЛЕКУЛ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ КРИСТАЛЛОВ И ПЛЕНОК

© 2022 г. Ю. А. Дьякова[1,*], М. В. Ковальчук[1,2]

[1] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия*

[2] *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия*

*****E-mail: Dyakova_YA@nrcki.ru*

Поступила в редакцию 12.04.2022 г.
После доработки 14.04.2022 г.
Принята к публикации 14.04.2022 г.

Представлены наиболее важные, уникальные результаты цикла исследований, проведенных под руководством М.В. Ковальчука, по изучению фундаментальных закономерностей взаимодействия белковых молекул и их самоорганизации при формировании упорядоченных систем. Разработан и апробирован принципиально новый научно-методический подход к мультимасштабному исследованию механизмов организации и структуры белковых систем, основанный на анализе их кристаллической структуры и применении комплекса рентгеновских, синхротронных, нейтронных методов и методов молекулярного моделирования. Данный подход состоит в изучении формирования предкристаллизационной фазы, т.е. образования кластеров-прекурсоров, 3D-фрагментов будущей структуры материала, на начальной стадии атомно-молекулярной организации системы в упорядоченную кристаллическую структуру. На примере модельного белка лизоцима изучены структура предкристаллизационной фазы, механизмы образования ее компонент и термодинамические параметры данной системы при формировании кристаллов и пленок. Разработанный подход эффективно применен к описанию структуры кластеров-прекурсоров в предкристаллизационной фазе ряда других белков, после чего предложенная структура была установлена и подтверждена экспериментально.

DOI: 10.31857/S0023476122050034

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение

1. Методы и подходы к исследованию взаимодействия белков в растворах и тонких пленках

1.1. Комплексный подход к исследованию белковых растворов, тонких пленок и кристаллов

1.2. Методы исследования структуры растворов белков

1.3. Методы анализа структуры белковых кристаллов

1.4. Методы получения и анализа структуры слабоупорядоченных систем

2. Определение структуры растворов в условиях кристаллизации на примере белка лизоцима, выявление механизма влияния термодинамических параметров на процесс кристаллизации

2.1. Об образовании "единиц роста" кристалла в кристаллизационном растворе белка

2.2. Состав кристаллизационного раствора лизоцима в различных условиях

2.3. Исследование динамики олигомеров лизоцима в растворах

2.4. Новый подход к поиску условий кристаллизации

3. Определение роли ионов осадителя в механизме кристаллизации белков по результатам исследований структуры растворов, кристаллов лизоцима и моделирования молекулярной динамики

3.1. Зависимость доли октамеров и димеров от катиона осадителя

3.2. Взаимодействие ионов (металлов и хлора) с молекулами лизоцима и их роль в образовании кристалла

3.3. Молекулярная динамика олигомеров в растворе лизоцима с добавлением осадителя NaCl в зависимости от температуры

4. Формирование ленгмюровских пленок на основе растворов лизоцима в условиях кристаллизации

5. Структура предкристаллизационной фазы для белков протеиназа K и термолизин

Заключение

ВВЕДЕНИЕ

Белки играют ключевую роль во всех жизненно важных физиологических процессах организмов: функционировании органов чувств, метаболизме клеток, передаче информации, формировании иммунного ответа, являются строительным материалом клетки и т.д. Функционирование белковых молекул основано на их специфическом взаимодействии с субстратом (от молекул воды и ионов до макромолекул – белков, ДНК, РНК и др.), определяющимся их трехмерной структурой и реализующимся по принципу "ключ-замок" [1]. Даже небольшие вариации структуры белков, вызванные как мутациями в самой полипептидной цепи, так и изменением ее пространственного строения, обусловленного взаимодействием с молекулярным и ионным окружением, ведут к резкому изменению их активности и функциональных свойств.

Таким образом, знание механизмов взаимодействия белков с компонентами растворов крайне важно для понимания функционирования белков в нативной среде, а также разработки технологий использования белков как функциональных элементов природоподобных технических систем. Сегодня знание трехмерной структуры белков и их комплексов с целевыми молекулами не только имеет фундаментальное значение для исследования механизмов функционирования живых организмов и вирусов, но и является неотъемлемой частью технологических процессов – дизайна и ускоренной разработки терапевтических препаратов и диагностических систем, технологий для сельского хозяйства и промышленной биотехнологии, биоэнергетики, а также создания новых биоподобных материалов.

Начало исследованиям структуры биомолекул с атомарным разрешением было положено в тридцатые годы прошлого века. Так, в 1934 г. получена первая рентгенограмма белкового кристалла, пепсина (одного из протеолитических ферментов), закристаллизованного в 1929 г., а в 1958 г. расшифрованы первые структуры глобулярных белков – миоглобина и гемоглобина.

В настоящее время наибольшее число структур белков и белковых комплексов (более 85%) решено с помощью метода рентгеноструктурного анализа (**РСА**). Для применения этого метода исследования структуры необходимо предварительно получить кристалл белка, причем чем более совершенным будет кристалл, тем с лучшим разрешением удастся определить структуру белковой молекулы. Белковые кристаллы получают из растворов, как правило, добавляя к раствору белка раствор осадителя, что приводит к изменению растворимости белка. Для того чтобы получить кристалл белка, необходимо, чтобы все параметры раствора (температура, концентрация белка и осадителя, pH, состав буферного раствора) попали в достаточно узкую область значений, при которых белковые молекулы выстраиваются в упорядоченную структуру.

В СССР огромный вклад в кристаллографию вообще и разработку метода РСА в частности внес академик Борис Константинович Вайнштейн, многие годы возглавлявший Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова АН СССР. Школа Вайнштейна заложила прочный фундамент развития структурной биологии и оказала решающее влияние на становление РСА биомакромолекул в нашей стране [2]. Механизмы взаимодействия и самоорганизации белковых молекул в растворах, в том числе при образовании белковых кристаллов, изучались ранее в [3]. Было показано, что добавление осадителя к раствору белка приводит к увеличению среднего радиуса частиц, сформированных из молекул белка в растворе [4, 5]. Были сделаны различные предположения о природе и возможной структуре комплексов белков, образующихся при кристаллизации, однако они не нашли однозначного экспериментального подтверждения. В большинстве представленных ранее гипотез о механизмах кристаллизации белков, основанных на предположении об образовании промежуточных белковых комплексов, допускалось, что такие комплексы формируются произвольным образом и могут содержать любое количество молекул.

Таким образом, дальнейшее продвижение в исследовании механизмов самоорганизации белков в упорядоченные системы требовало применения экспериментальных методов исследования структуры биологических молекул в нативном состоянии и в пленках с высоким разрешением. Основа создания и развития таких методов и экспериментальной техники для исследования процессов самоорганизации биологических молекул и систем заложена Михаилом Валентиновичем Ковальчуком. Им был выполнен цикл пионерских работ по развитию метода стоячих рентгеновских волн в области полного внешнего отражения (**СРВ в ПВО**), позволившего с субангстремной точностью исследовать тонкие слои и пленки [6–8], развит подход по применению данного и других высокоразрешающих рентгеновских методов для исследования биологических пленок [9–11]; создана уникальная экспериментальная техника, включая не имеющие аналогов экспериментальные станции на источнике синхротронного излучения (**СИ**) [12]. Под руководством Михаила Валентиновича введен в эксплуатацию и модернизирован единственный действующий сегодня на постсоветском пространстве специализированный Курчатовский источник синхротронного излучения ("КИСИ-Курчатов"), инфраструктура которого позволяет проводить комплексные исследования биомолекул и биоси-

стем на современном уровне [12, 13]; создан комплекс “Белковая фабрика”, позволяющий наработать, выделить и очистить любой белок, провести скрининг условий его кристаллизации в автоматическом режиме [2, 14]; создан суперкомпьютерный центр [15] для анализа и обработки экспериментальных данных и молекулярного моделирования.

Поскольку к настоящему времени наибольшее число белковых структур решено с помощью метода РСА, это делает его наиболее эффективным методом определения трехмерной структуры биомолекул с высоким (атомарным) разрешением. Однако доля белков, для которых определена трехмерная структура, составляет проценты от количества известных белков, что связано главным образом с необходимостью получения кристалла белка, поскольку в основе РСА лежат регистрация и анализ дифракционной картины от кристаллической структуры.

С развитием технологий генерации СИ – появлением источников СИ четвертого поколения и рентгеновских лазеров на свободных электронах – требования к размеру кристалла снижаются. Для определения структуры макромолекулы с атомарным разрешением достаточно получить кристаллы субмикронного размера.

Основным “узким” местом определения структуры белков методом РСА остается поиск условий кристаллизации, необходимый даже для получения нанокристаллов, который сегодня проводится методом проб и ошибок. При этом для оценки результата – образования кристалла – может потребоваться от нескольких часов до нескольких месяцев.

Решение указанных выше проблем требует разработки новых методов и подходов к исследованию взаимодействия белковых молекул и механизмов их самоорганизации в упорядоченные системы. Такие подходы и методы должны обеспечить определение с высоким пространственным разрешением структуры не только кристаллов, но и слабоупорядоченных систем, включая растворы. Для эффективного решения данной задачи необходимо применение комплекса взаимодополняющих современных экспериментальных методик определения структуры белков и их комплексов в нативном состоянии с атомарной точностью – синхротронные и нейтронные методы исследования структуры, молекулярное моделирование и пр. Таким образом, знание фундаментальных основ взаимодействия белковых молекул и механизмов их самоорганизации в упорядоченные системы, основанное на применении указанного выше инструментария, необходимо как для решения технологических задач сегодняшнего дня – ускоренного дизайна лекарственных препаратов и методов диагностики, разработки новых биотехнологий, подходов к обеспечению биобезопасности, так и для формирования нового базиса создания принципиально новых природоподобных технологий.

В течение последних нескольких лет научной группой под руководством М.В. Ковальчука проведен цикл работ с целью выявления фундаментальных закономерностей взаимодействия белковых молекул и их самоорганизации при формировании упорядоченных систем на основе применения нового подхода к широкомасштабному исследованию механизмов организации и структуры белковых систем в растворах, основанного на применении синхротронных и нейтронных методов и молекулярного моделирования. В ходе этой работы получен ряд уникальных, прорывных научных результатов, представлению и анализу которых посвящен настоящий обзор.

1. МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ К ИССЛЕДОВАНИЮ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЕЛКОВ В РАСТВОРАХ И ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

Настоящий раздел посвящен методам и подходам к изучению структуры неупорядоченных, слабоупорядоченных и кристаллических систем, позволяющим проводить исследование взаимодействия белков в растворах и тонких пленках.

Под руководством М.В. Ковальчука в НИЦ “Курчатовский институт” создана уникальная инфраструктура для решения современных научных задач, в том числе изучения структуры белков и систем на их основе, включающая в себя экспериментальные станции СИ на источнике “КИСИ-Курчатов” (станции “Ленгмюр”, “РКФМ”, “БиоМУР”, “РСА” и др.) [16], исследовательские комплексы крио-ПЭМ [17], ЯМР [18], Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса [15]. Под его научным руководством ранее были развиты методы структурной диагностики и анализа наносистем, тонких пленок и многослойных систем, как на твердых подложках, так и на поверхности жидкости, на основе сочетания дифракционных, спектральных методов и методов рассеяния рентгеновского излучения, включая метод СРВ в ПВО [6–11, 19–23].

Созданная инфраструктура и указанные выше научно-методические подходы позволяют подобрать комплекс взаимодополняющих, комплементарных методов для исследования белковых систем, в том числе в нативном состоянии, и тем самым *проследить переход “от хаоса к порядку” и провести анализ структуры белковых систем на всех его стадиях.*

1.1. Комплексный подход к исследованию белковых растворов, тонких пленок и кристаллов

На рис. 1 представлена блок-схема, иллюстрирующая суть (структуру) методологического под-

Рис. 1. Блок-схема, иллюстрирующая суть (структуру) методологического подхода к исследованию взаимодействия белков в растворах и процессов кристаллизации, – от растворов до слабоупорядоченных и кристаллических систем.

хода к исследованию процессов кристаллизации, – от растворов до слабоупорядоченных и кристаллических систем. Методология исследований состоит в изучении белковых систем в трех состояниях (раствор, монослой, кристалл), а также процесса перехода между этими состояниями в различных условиях (температура, концентрация компонентов растворов, тип растворителя и др.).

Таблица 1. Комплекс взаимодополняющих методов исследования взаимодействия белков в растворах и процессов кристаллизации

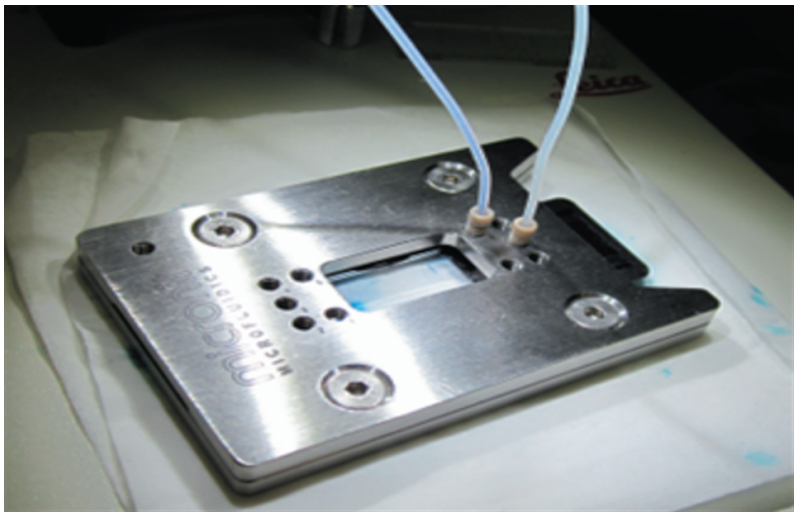
	Методы исследований
Раствор	1. Малоугловое рассеяние рентгеновского, синхротронного излучения и нейтронов (МУРР, МУРН) 2. Динамическое рассеяние света (ДРС) 3. Молекулярная динамика
Слабоупорядоченные системы (ленгмюровские монослои)	4. π/А-изотерма 5. Атомно-силовая микроскопия (АСМ) 6. Рентгеновская рефлектометрия 7. Стоячие рентгеновские волны в области полного внешнего отражения (СРВ в ПВО)
Кристаллические системы	8. Оптическая микроскопия 9. Рентгеноструктурный анализ (РСА)/Белковая кристаллография 10. *In situ* рентгеновская высокоразрешающая дифрактометрия

В табл. 1 приведен комплекс взаимодополняющих методов, сгруппированных в соответствии со структурой научно-методического подхода (рис. 1) к исследованию взаимодействий белков в различных системах.

В силу специфики работы с органическими материалами (“живыми” системами) практически для каждого из указанных методов (табл. 1) требуется адаптация методик измерений и подбор условий экспериментов, которые позволяли бы в ходе исследований сохранять белки в состоянии, максимально приближенном к нативному. Были разработаны специальные методики исследований, в том числе специализированное оборудование – экспериментальный комплекс окружения образца для исследования белковых систем в нативном состоянии, включающий в себя четыре специализированные измерительные ячейки и позволяющий проводить исследования с применением рентгеновского излучения и СИ, а также оптических методов:

– термостатируемая ячейка для исследований методом малоуглового рентгеновского рассеяния (**МУРР**) с использованием СИ (на станциях СИ “БиоМУР”, “ДИКСИ” [24, 25] источника “КИСИ-

(а)



(б)

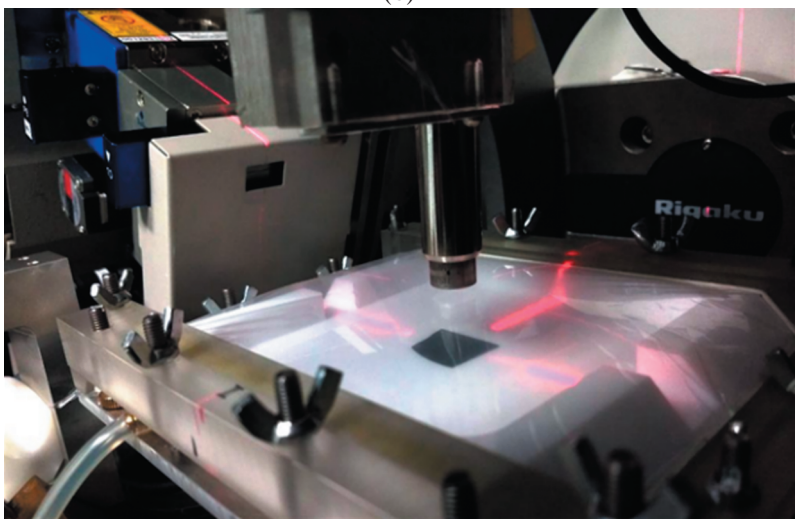


Рис. 2. Измерительные ячейки для образцов растворов и кристаллов: а – микрофлюидная ячейка; б – специализированная ячейка для исследований белковых структур методом СРВ в ПВО.

Курчатов", НИЦ "Курчатовский институт", Москва);

– микрофлюидная ячейка для оптимизации расхода белков и изучения структуры их растворов методом МУРР [26, 27] (рис. 2а);

– специализированная ячейка для структурных *in situ*-исследований слабоупорядоченных и кристаллических белковых систем на стадиях зарождения и роста кристаллов рентгеновскими и оптическими методами [28, 29];

– специализированная ячейка проточного типа, позволяющая реализовать исследования белковых структур (кристаллы, ленгмюровские пленки) в условиях гелиевой атмосферы методами СРВ в ПВО, рентгенофлуоресцентного анализа и др. (рис. 2б). Обеспечивает уменьшение фона флуоресцентного излучения, позволяет исключить из флуоресцентного спектра линию Ar, перекрывающую сигналы от ряда элементов – K, Cl, S и др.

В последующих разделах приводится краткое описание каждой группы методов (табл. 1), применяемых для исследования структуры растворов белка (разд. 1.2), кристаллов (разд. 1.3) и тонких пленок (разд. 1.4).

1.2. Методы исследования структуры растворов белков

Малоугловое рассеяние рентгеновского излучения и нейтронов. Исследования состояния и взаимодействия белковых молекул в растворе как до добавления осадителя (в отсутствие взаимодействия, приводящего к образованию упорядоченной структуры), так и непосредственно после добавления осадителя проводятся методами МУРР и малоуглового рассеяния нейтронов (**МУРН**).

Малоугловое рассеяние (**МУР**) – когерентное диффузное рассеяние монохроматических рентгеновских лучей и нейтронов вблизи первичного луча на апериодических флуктуациях электронной плотности в материалах. При типичных длинах волн излучения в диапазоне от 0.05 до 0.5 нм МУР позволяет исследовать структуры размером от единиц до нескольких сотен нанометров, обычно в диапазоне ~1–200 нм. Указанные методы позволяют определить изменение характера взаимодействия белковых молекул в растворе, а также фиксировать образование частиц (олигомеров) размером от двух молекул (димеров).

Основы метода МУРР/МУРН, его подробное описание и применения изложены в ряде научных работ и монографий [30–33].

Исследования растворов белков методами МУРР/МУРН проводились с использованием разных установок, как лабораторных, так и установок класса "мегасайенс" (источников СИ и нейтронов):

– Лабораторная рентгеновская установка АМУР-К (ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, ИК РАН, Москва) [34];

– Станции СИ "ДИКСИ" [24] и "БиоМУР" [25] ("КИСИ-Курчатов");

– Станция СИ "BM29 BioSAXS" [35, 36] (ESRF, Гренобль, Франция);

– Нейтронная станция ЮМО [37] (ОИЯИ, ИБР-2, Дубна).

Проводилось исследование изменения структуры растворов белка с осадителем для разных условий. При этом для каждого эксперимента проводилась регистрация МУР от раствора белка с осадителем, раствора осадителя в буфере (вычиталось, как фон при обработке данных), а также в качестве контроля регистрировалось МУР от раствора белка без осадителя.

Для анализа экспериментальных данных МУР на основании известной трехмерной структуры белка с использованием программ COOT [38] и PyMOL [39] были построены модели различных олигомеров – димер, тетрамер, октамер и др. Первичную обработку полученных экспериментальных данных и расчеты интенсивности МУРР проводили с помощью программ AGBEH, SASPLOT, CRYSOL, MIXTURE, OLIGOMER [40] и ряда других с использованием методики, описанной в [41]. Дальнейшая обработка проводилась с использованием OLIGOMER. Первичная обработка экспериментальных данных МУРР, полученных на "BM29 BioSAXS" (ESRF), проводилась с помощью системы "SaxsAnalysis" [42]. Следующие этапы обработки выполнялись с помощью программы PRIMUS [43], входящей в программный пакет ATSAS [40, 44]. Обработка данных МУРН проводилась с использованием программы SAS [45], а расчетные кривые рассеяния от заданных моделей олигомеров были получены с использованием программы CRYSON [46].

Динамическое рассеяние света. Метод динамического рассеяния света (**ДРС**) (также известен как метод фотон-корреляционной спектроскопии или квазиупругого рассеяния света) – один из наиболее распространенных методов, используемых для определения размера эмульсий, мицелл, полимеров, белков, наночастиц или коллоидных частиц, диспергированных или растворенных в жидкости [47]. Измеряя и анализируя флуктуацию интенсивности рассеяния света (а именно частоту осцилляций интенсивности света относительно среднего значения, используя автокорреляционную функцию), можно вычислить коэффициент диффузии, рассчитать распределение частиц по размерам и дать описание движения частиц в растворе (в среде).

Разрешающая способность данного метода – от нескольких нанометров до нескольких микрометров. Метод ДРС эффективно применяется для исследования монодисперсных растворов слабой концентрации. Таким образом, метод ДРС позволяет контролировать образование в растворе более крупных агрегатов, чем регистрируемые методами МУРР/МУРН.

*Метод молекулярной динамики (**МД**)* – метод, в котором временная эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения [48, 49]. Метод МД допускает рассмотрение большого числа частиц, так как при расчетах решаются только уравнения Ньютона:

$$m_i \frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = -\frac{dU}{d\mathbf{r}_i}, \qquad (1)$$

где m_i, $\mathbf{r}_i$ – масса и радиус-вектор i-й частицы, $\mathbf{F}_i$ – сумма сил, действующих на частицу, U –потенциальная энергия системы частиц, t – время.

Метод МД широко применяется для моделирования динамики молекул и их агломератов в растворе и в условиях кристаллизации. В [50] метод МД использован с целью определения стабильности олигомеров белка в растворе, что является принципиально важным при анализе структуры растворов белка как в присутствии, так и в отсутствие осадителя, а также при разных температурах. Моделирование методом МД выполнено с использованием оборудования ЦКП "Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса" (суперкомпьютер) [15], Объединенный вычислительный кластер, НБИКС-ПТ, НИЦ "Курчатовский институт" (Москва). Расчеты проведены с помощью программного пакета GROMACS версии 5.0.4 [51] в поле Amber ff99SB-ILDN [52].

1.3. Методы анализа структуры белковых кристаллов

Анализ структуры белковых кристаллов проводился рентгенодифракционными методами: расшифровка структуры методом РСА; оценка степени совершенства кристалла белка в процессе его роста методом *in situ* высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии.

Образование кристаллов и кристаллографическая ориентация граней определялись методом оптической микроскопии.

Структура полученных кристаллов определялась методом РСА. Дифракционный набор от кристалла собирали при температуре 100 K на станции "БЕЛОК" [53], модернизированной станции "РСА" (с 2018 г.) [54] (НИЦ "Курчатовский институт", Москва). В качестве детектора использовалось ПЗС-устройство Rayonix SX165. Дифракционные данные получены с использованием монокристалла путем вращения. Длина волны составляла 0.8 Å, диапазон колебаний – 1°, угол поворота – 180°. Обработка наборов экспериментальных интенсивностей проводилась с использованием программного обеспечения iMosflm [55]. Структуры определены методом молекулярного замещения с использованием программного обеспечения PHASER [56] и структуры лизоцима из куриного яйца (PDBID 4WLD) в качестве исходной модели. Атомные модели уточнены с использованием программы REFMAC [57].

Вследствие потери воды на воздухе, содержание которой в кристалле белка может достигать 70%, кристаллы белков быстро разрушаются. В связи с этим для исследований степени их совершенства *in situ* в процессе роста рентгеновскими методами, в том числе методом высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии, разработана и создана специальная кристаллизационная измерительная ячейка в составе экспериментального комплекса окружения образца, описанного в разд. 1.1. Подробное описание ячейки и результаты исследований, полученные с ее использованием, представлены в [28, 29].

1.4. Методы получения и анализа структуры слабоупорядоченных систем

В целях анализа структуры слабоупорядоченных систем изучались планарные белковые системы из кристаллизационных растворов с добавлением осадителя, которые были сформированы с применением ленгмюровской технологии [29, 58, 59]. Ленгмюровские монослои получены как на поверхности водной субфазы, так и при переносе на твердые подложки.

Для переноса белковых пленок на твердые подложки (монокристалл Si, предметные стекла с различными покрытиями) применялся метод Ленгмюра–Шеффера [60–63]. Структура полученных монослоев контролировалась с помощью записи изменения поверхностного давления пленки (монослоя) в зависимости от площади, приходящейся на одну молекулу (изотерма сжатия, π/A-изотерма). Полученные монослои переносили на кремниевые и стеклянные подложки, после чего сформированные пленки исследовали методами атомно-силовой микроскопии (**АСМ**), рентгеновской рефлектометрии (**РР**), СРВ в ПВО [64]. Исследования монослоев лизоцима проводились методом СРВ в ПВО как на поверхности жидкости в процессе их формирования, так и после переноса на твердую подложку.

Структурные исследования пленок белка как на твердых подложках, так и на поверхности жидкости проводили методами СРВ в ПВО и РР [8, 23]. Метод СРВ в ПВО основан на одновременной регистрации интенсивности зеркальной компоненты рентгеновского отражения (метод РР) и угловой зависимости выхода рентгеновской флуоресценции.

Метод РР широко используется в исследованиях качества поверхности и определения параметров планарных периодических и апериодических наносистем (шероховатостей, толщин, плотностей), в том числе органических пленок [65, 66], многослойных систем на их основе и монослоев на поверхности жидкости [67]. Форма угловой зависимости зеркальной компоненты рентгеновского отражения дает информацию о распределении общей электронной плотности по нормали к поверхности, которая определяет распределение СРВ [68, 69].

Метод СРВ в ПВО, являющийся частным случаем метода СРВ, сочетает в себе возможности рентгеновского рассеяния и спектроскопии [8, 70, 71] и успешно применяется для исследования различного рода тонкопленочных планарных систем [10, 72]. Применение данного метода позволяет получать профили распределения атомов определенного сорта по нормали к поверхности образца. Алгоритм восстановления профиля заключается в представлении системы пленка–подложка в виде слоистой модели, характеризующейся ступенчатым профилем электронной плотности [73, 74]. Параметры слоев исходной модели уточнялись путем минимизации методом Левенберга–Марквардта [68] расхождения между расчетными и экспериментальными данными.

Применение данного метода в работе позволило определить распределение атомов химических элементов по толщине пленки – анализ распределения ионов осадителя (K, Cl, Cu, Ni и т.д.) и молекул белка (S). Исследования проводились как на лабораторном источнике, так и на синхротронной станции РКФМ [75, 76] (НИЦ "Курчатовский институт", Москва).

Использование уникальной синхротронной станции "Ленгмюр" [22, 77] (НИЦ "Курчатовский

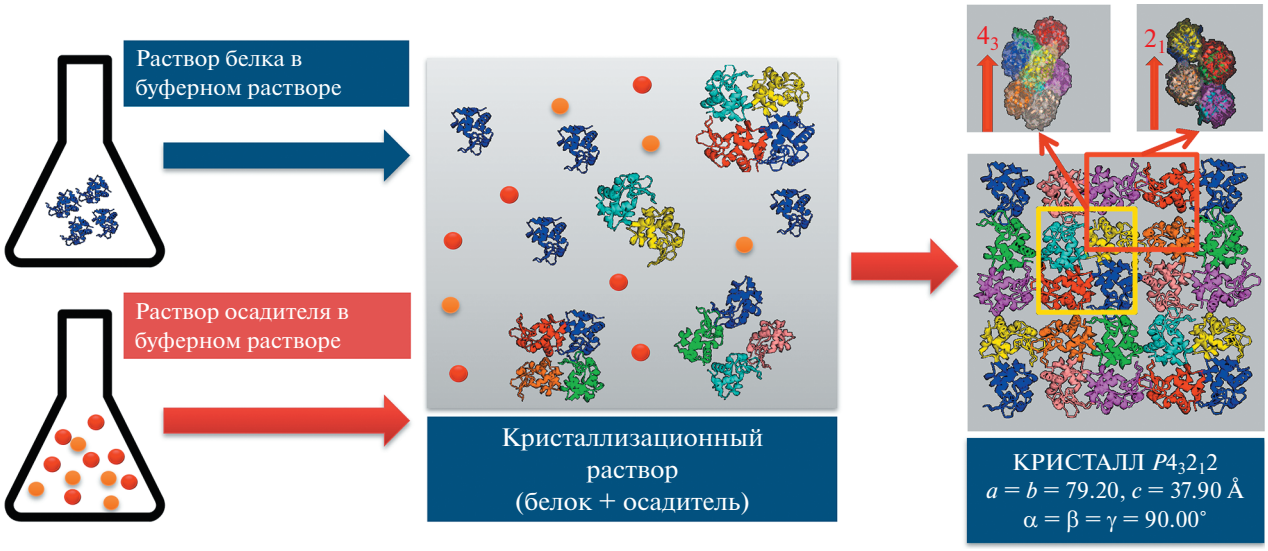


Рис. 3. Схема, иллюстрирующая гипотезу, – в растворе белка при создании условий кристаллизации образуются олигомеры, являющиеся составными элементами кристалла.

институт", Москва) позволило исследовать взаимодействие слоя белка с компонентами субфазы непосредственно в процессе формирования монослоя на поверхности жидкости, что дало дополнительную информацию о роли осадителя в процессе образования упорядоченных белковых структур.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ РАСТВОРОВ В УСЛОВИЯХ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ПРИМЕРЕ БЕЛКА ЛИЗОЦИМА, ВЫЯВЛЕНИЕ МЕХАНИЗМА ВЛИЯНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ПРОЦЕСС КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

В настоящем разделе представлено описание результатов определения структуры растворов в условиях кристаллизации на примере белка лизоцима и механизмов влияния термодинамических параметров на процесс кристаллизации, полученных в [78–83]. Исследовано влияние температуры [79–81], концентраций белка и осадителя [80–82], растворителя [82] на количество октамеров и димеров, образующихся в растворе перед началом кристаллизации. Установление взаимосвязи между олигомерным составом кристаллизационного раствора и образованием кристалла позволило разработать *технологический процесс* ускоренного подбора условий кристаллизации.

2.1. Об образовании "единиц роста" кристалла в кристаллизационном растворе белка

Авторами было сделано предположение (гипотеза), что еще до начала образования зародышей кристалла в растворе белка при создании условий кристаллизации образуются олигомеры, являющиеся составными элементами, из которых впоследствии образуется кристалл. Эмпирическая проверка данного предположения проведена на примере изучения процесса образования кристалла лизоцима тетрагональной сингонии.

Выбраны условия (концентрация белка 40 мг/мл, осадитель – NaCl с концентрацией 25 мг/мл, температура 20°C), при которых стабильно получались достаточно крупные и совершенные кристаллы тетрагональной сингонии (пр. гр. $P4_32_12$, $a = b = 79.20$, $c = 37.90$ Å, $\alpha = \beta = \gamma = 90.00°$). Предварительный анализ данных, полученных МУРР от растворов лизоцима с добавлением осадителя, показал, что в условиях кристаллизации в растворе помимо мономеров образуются частицы, объем которых приблизительно в 8 раз превышает объем одной молекулы [78].

Так, в [78, 79] впервые была выдвинута гипотеза о том, что образующиеся в кристаллизационном растворе белка комплексы имеют строго определенную структуру и представляют собой промежуточную предкристаллизационную фазу. Эти комплексы возникают еще до начала образования зародышей кристаллов и представляют собой олигомеры белка, которые в дальнейшем участвуют в качестве структурных элементов в процессе роста кристаллической фазы. Схема, иллюстрирующая суть гипотезы, представлена на рис. 3.

2.2. Состав кристаллизационного раствора лизоцима в различных условиях

На основе анализа структуры кристалла лизоцима предложены модели различных олигомеров, являющихся элементарными мотивами кристаллической решетки (рис. 4).

Использование таких моделей для обработки экспериментальных данных МУРР позволило качественно и количественно определить состав полидисперсного раствора. Результаты показали, что при добавлении осадителя в растворе белка

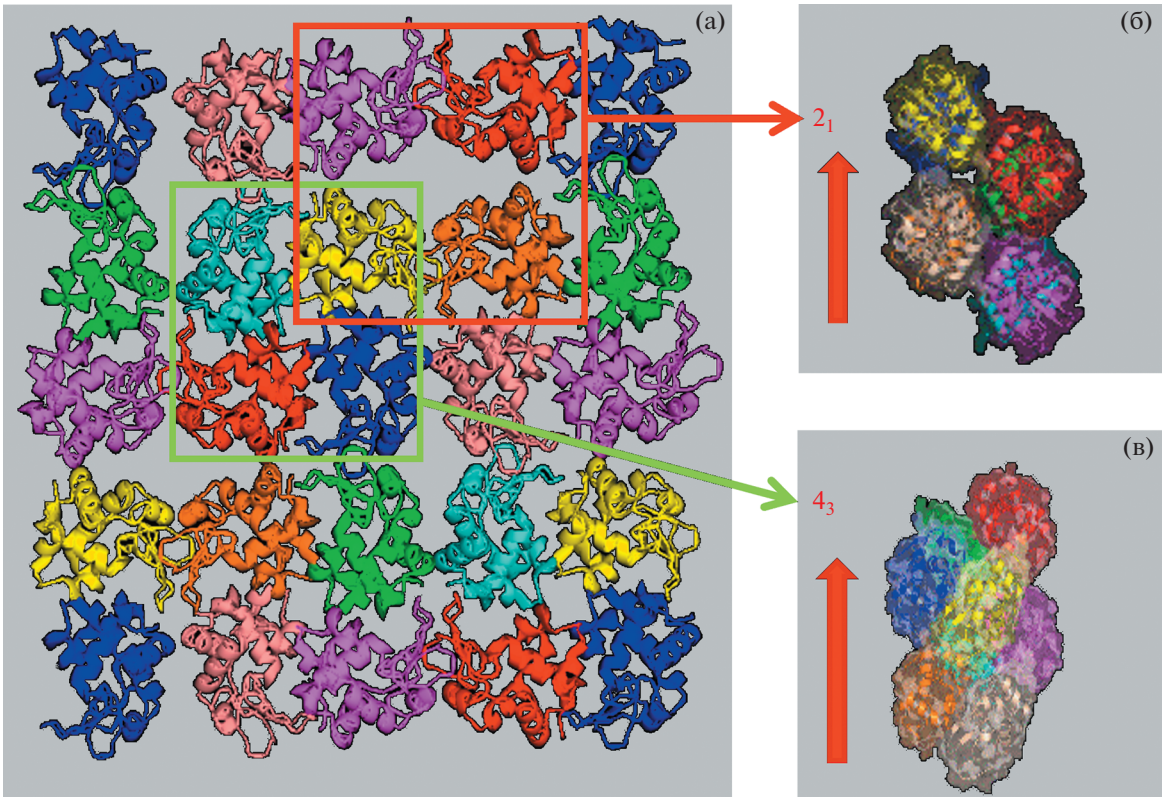
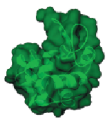
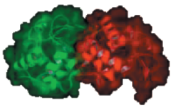
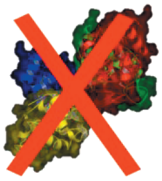
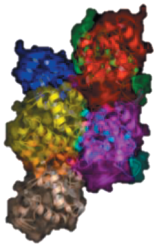


Рис. 4. Построение двух типов октамеров на основе структуры кристалла лизоцима тетрагональной сингонии: а – проекция кристаллической решетки перпендикулярно оси четвертого порядка; б – октамер типа А (обладающий минимальным объемом) – стабильный; в – октамер типа Б (имеет больший объем) – нестабильный.

перед началом кристаллизации образуются димеры и октамеры, при этом других олигомеров не образуется [78, 79]. Аналогичные исследования были проведены с помощью комплементарного метода МУРН [81], а также на различных синхротронных станциях МУРР [79, 80, 82]. Результаты всех проведенных экспериментов оказались сходны – в растворе белка с осадителем помимо мономеров наблюдалось образование димеров и около 3–4% октамеров (табл. 2). Несколько отличаются результаты исследования растворов лизоцима методом МУРН (количество октамеров, об-

Таблица 2. Олигомерный состав растворов лизоцима с добавлением осадителя, определенный методом малоуглового рассеяния на различных экспериментальных установках

	Мономер	Димер	Тетрамер	Гексамер	Октамер
					
ИК РАН (АМУР-К) [78]	96.0	1.9	0.0	0.0	2.1
ККСНИ (ДИКСИ) [79]	95.2	1.0	0.0	0.0	3.8
ESRF (BioSAXS) [80]	90.6	6.3	0.0	0.0	3.1
ИБР-2* (ЮМО) [81]	88.8	1.4	0.0	0.0	9.6*

Примечание. $C_{белка}$ = 40 мг/мл, C_{NaCl} = 40 мг/мл, температура 20°C, NaAc-буфер, pH = 4.5.
* Растворитель – D_2O.

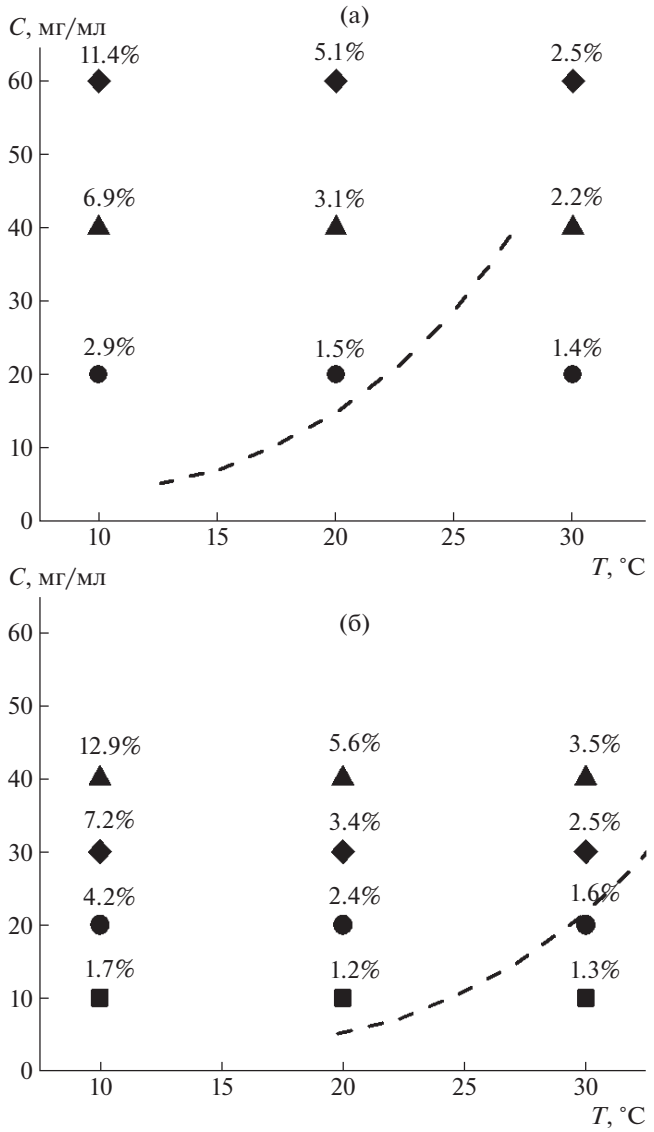


Рис. 5. Количество октамеров, образующихся при разной температуре и концентрации белка в H_2O (а) и D_2O (б).

наруженных в растворе, превышает 9%), что связано с тем, что при проведении данных исследований белок растворяли в тяжелой воде (дейтерированной, D_2O), которая оказывает существенное влияние на процесс и условия кристаллизации.

Показано, что количество октамеров растет при понижении температуры и повышении концентрации белка [79–81]. При этом октамеры в растворе сохраняются после образования кристаллов, непосредственно в процессе их роста, но их количество уменьшается по мере уменьшения концентрации лизоцима, находящегося в растворенном состоянии.

В [82] представлены результаты исследований методом МУРР изменения состава раствора лизоцима в дейтерированной воде в условиях кристаллизации. Показано, что при замене растворителя – обычной воды (H_2O) на D_2O – на начальной стадии кристаллизации лизоцима в условиях роста кристалла так же, как и в случае растворителя H_2O, образуются димеры и октамеры, причем количество октамеров растет при повышении концентрации белка и понижении температуры. Замена растворителя приводит к увеличению процентного содержания октамеров в растворе при прочих равных условиях.

Результаты исследований термодинамических параметров раствора белка лизоцима в условиях кристаллизации как в H_2O, так и в D_2O представлены на рис. 5 [82].

2.3. Исследование динамики олигомеров лизоцима в растворах

В кристаллической решетке лизоцима тетрагональной сингонии октамеры можно выделить различными способами (рис. 4). Использование разных моделей октамеров А, Б для обработки данных МУР приводило к результатам, которые совпадали в пределах ошибки.

Для определения типа октамера, А или Б, который образуется в растворе, а также объяснения того факта, что в растворе не наблюдается других олигомеров, были проведены исследования методом МД устойчивости различных олигомеров в условиях, соответствующих кристаллизации. На траектории 100 нс в присутствии и в отсутствие осадителя выполнено моделирование поведения октамеров двух возможных типов А и Б, которые путем трансляции образуют кристаллическую решетку кристалла лизоцима тетрагональной сингонии.

В результате исследований [83] показано, что в присутствии осадителя стабилен октамер типа А, в то время как октамер типа Б диссоциирует как в присутствии, так и в отсутствие осадителя. Также установлено поведение тетрамеров, гексамеров и димеров различного типа – в присутствии осадителя тетрамеры и гексамеры различных типов диссоциируют на составляющие, а димеры устойчивы.

2.4. Новый подход к поиску условий кристаллизации

На основе гипотезы об образовании “единиц роста” (олигомеров, являющихся составными элементами будущей кристаллической структуры) в кристаллизационном растворе белка, а также исследований методами МУРР/МУРН, молекулярного моделирования и МД, результаты которых представлены в настоящем разделе, предложен *новый подход к поиску условий кристаллизации белков* [84].

Предложенный подход состоит в установлении взаимосвязи между параметрами раствора,

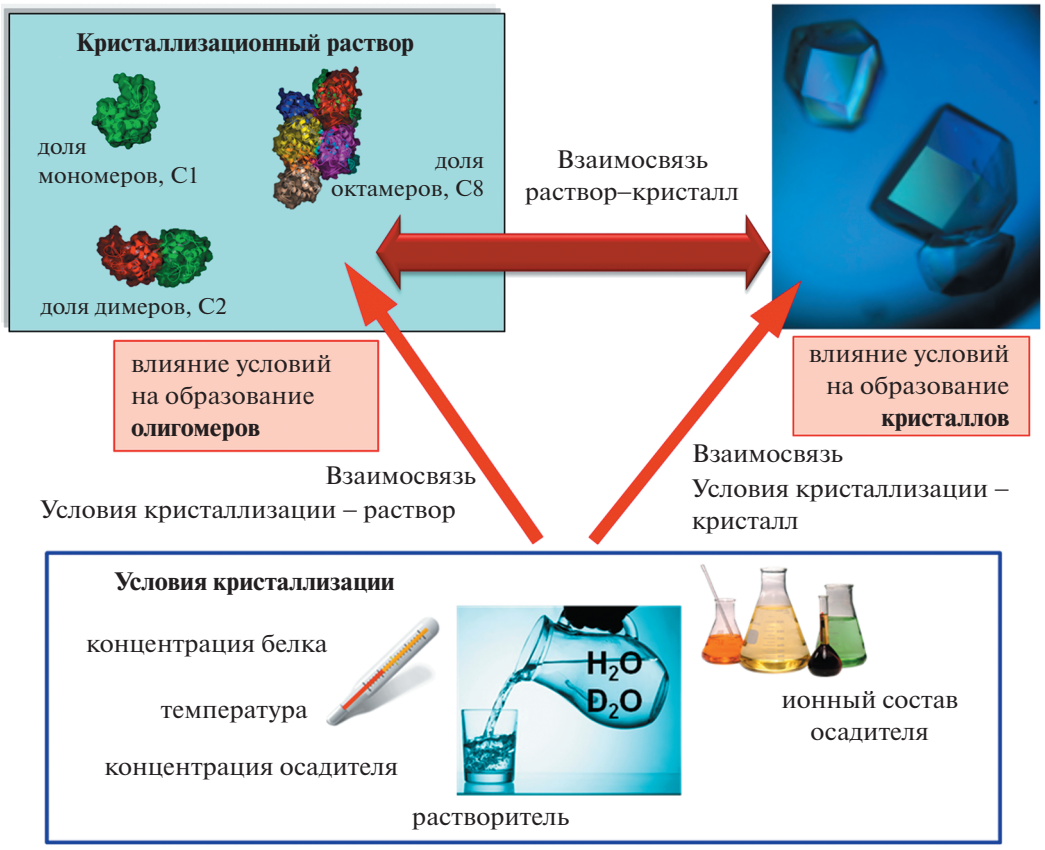


Рис. 6. Блок-схема, иллюстрирующая предложенный подход к поиску условий кристаллизации белков.

образованием олигомеров в растворе и образованием кристаллов. Блок-схема, иллюстрирующая предложенный подход к поиску условий кристаллизации белков, представлена на рис. 6.

Установление взаимосвязи между олигомерным составом кристаллизационного раствора и образованием кристалла позволит более осознанно, целенаправленно подбирать условия кристаллизации на основе исследования структуры раствора сразу после добавления осадителя.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ РОЛИ ИОНОВ ОСАДИТЕЛЯ В МЕХАНИЗМЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БЕЛКОВ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ИССЛЕДОВАНИЙ СТРУКТУРЫ РАСТВОРОВ, КРИСТАЛЛОВ ЛИЗОЦИМА И МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В разделе представлены результаты исследований роли ионов осадителя в механизме кристаллизации белков по результатам анализа структуры растворов [85], кристаллов лизоцима [86] и моделирования МД [87].

3.1. Зависимость доли октамеров и димеров от катиона осадителя

В [85] изучено влияние ионного состава осадителя на образование олигомеров разного типа. Показано, что замена аниона приводит к изменению сингонии кристалла лизоцима. Исследовано влияние типа катиона и концентрации осадителя в ряду хлоридов (NaCl, KCl, LiCl, $NiCl_2$, $CuCl_2$, $CoCl_2$) на объемную долю олигомеров (димеров, октамеров), образующихся перед началом кристаллизации белка. Объемные доли димеров и октамеров возрастают с увеличением концентрации осадителя и понижением температуры (рис. 7). В ряду одновалентных ионов объемная доля октамеров увеличивается в порядке $K^+ - Na^+ - Li^+$, а для двухвалентных – в порядке Cu^{2+}–Ni^{2+}–Co^{2+}, что соответствует ряду Гофмейстера увеличения энергии гидратации [88].

3.2. Взаимодействие ионов (металлов и хлора) с молекулами лизоцима и их роль в образовании кристалла

На основе структурных данных, полученных с высоким разрешением, в [86] проанализированы связи между молекулами лизоцима в кристалле и

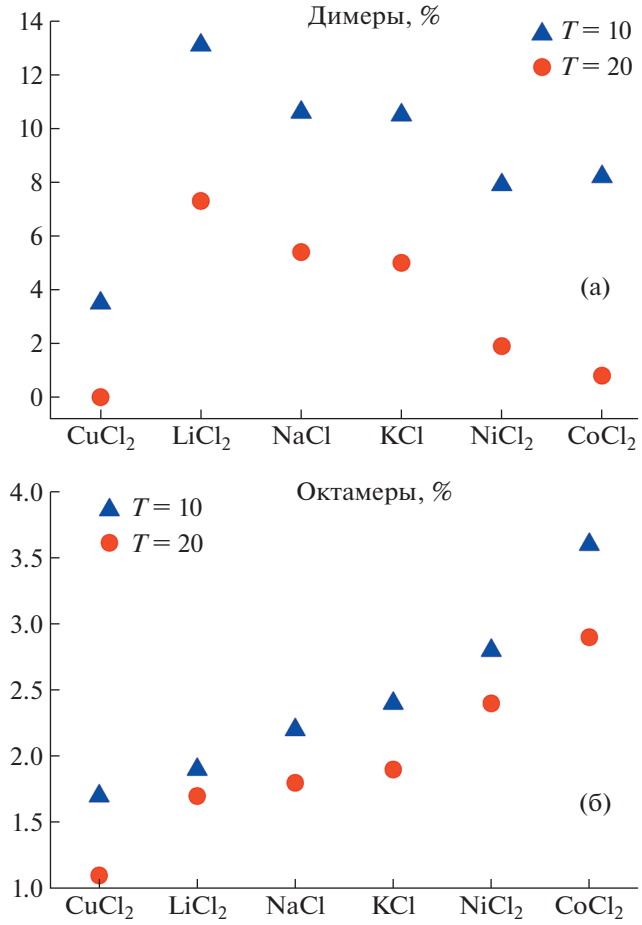


Рис. 7. Количество димеров (а) и октамеров (б), образующихся в растворе при добавлении к раствору лизоцима в качестве осадителя хлоридов различных металлов.

ионами хлоридов – осадителей (NaCl, KCl, LiCl, $NiCl_2$, $CuCl_2$). Ионы металлов и хлора можно разделить на три группы: 1 – связанные непосредственно с молекулой белка; 2 – связанные с молекулами белка в прекурсоре кристалла (димере и октамере); 3 – расположенные на границе октамеров в кристалле.

Выявлено, что кристаллы, выращенные с различными осадителями, различаются по количеству связанных ионов металла и хлорида (рис. 8, табл. 3).

Для всех осадителей показано, что:

– ионы группы 1 обеспечивают распределение поверхностного заряда, приводящее к упорядоченной ассоциации молекул и образованию прекурсоров кристалла – октамеров, влияют на равновесную концентрацию октамеров в кристаллизационных растворах и обеспечивают дальнейший рост кристаллов;

– ионы хлора и металла группы 2 вносят вклад в конформационную стабильность октамера посредствам взаимодействия с аминокислотными остатками, принадлежащими удаленным сегментам полипептидной цепи;

– ионы группы 3 способны различным образом влиять на связывание октамеров между собой. Так, для ионов Cu, расположенных на границе октамера, обнаружены особенности, которые оказывают влияние на равновесную концентрацию октамеров. Ионы Cu образуют регулярную пространственную сетку в кристалле белка и потенциально способны взаимодействовать друг с другом и влиять на физические свойства кристалла белка.

3.3. Молекулярная динамика олигомеров в растворе лизоцима с добавлением осадителя NaCl в зависимости от температуры

С учетом позиций ионов осадителя NaCl в структуре лизоцима проведено МД-моделирование мономеров и олигомеров (мотивов кристаллической структуры) в условиях, в которых ранее проводились эксперименты по исследованию процесса кристаллизации методами МУРР и МУРН (разд. 2.2) [79–82].

Из кристаллической структуры лизоцима тетрагональной сингонии (PDB ID: 6QWY) (разд. 3.2) [86] выделялись молекулярные модели возможных единиц роста кристалла лизоцима. В структуре олигомеров оставляли ионы осадителя NaCl, связанные с лизоцимом (на одну молекулу белка приходится три иона натрия и четыре иона хлора) (табл. 3), воду удаляли.

Проведено сравнение результатов, полученных методом МД в трех случаях: использовались

Таблица 3. Количество ионов хлора и металла в мономере в кристаллах лизоцима, полученных с разными осадителями

Осадитель	$CuCl_2$	$NiCl_2$	NaCl	KCl	LiCl
PDB ID	6QWW	6QWX	6QWY	6QWZ	6QX0
Количество анионов (ионов Cl^-)	6	4	4	5	3
Количество катионов (ионов металла)	4	2	3		

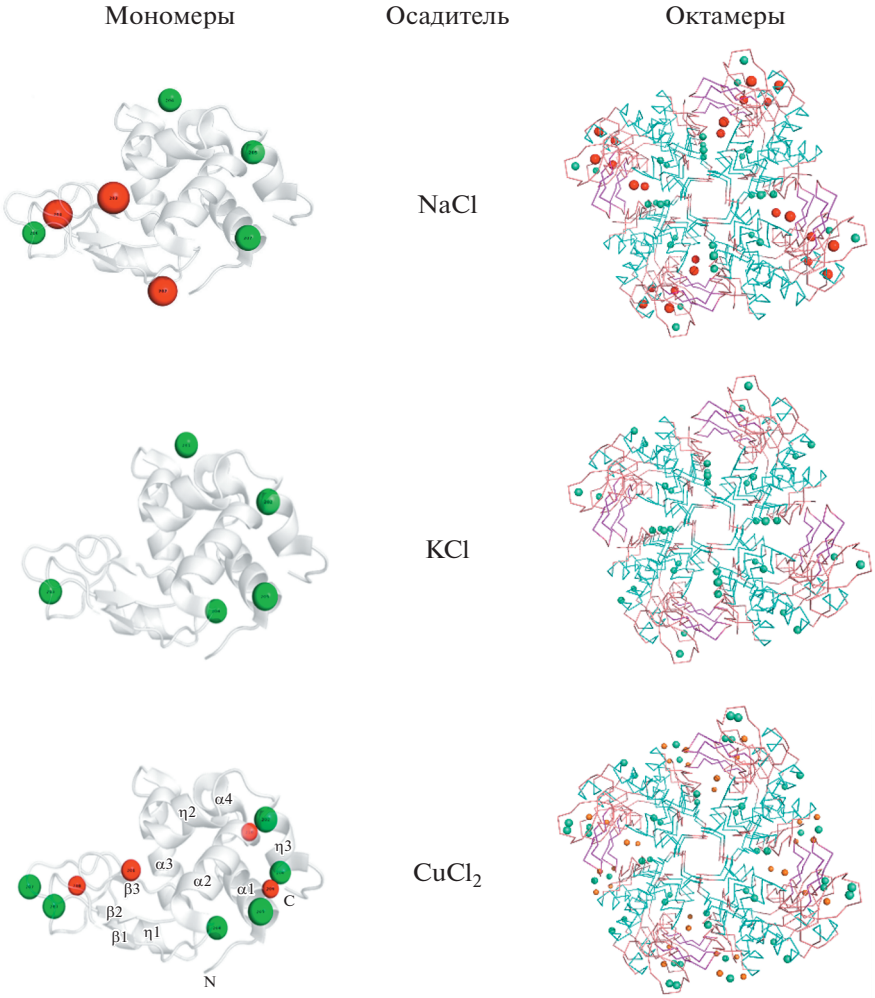


Рис. 8. Локализация ионов осадителя в кристалле лизоцима (левый ряд – молекулы, правый – октамеры). С осадителем KCl – ион калия в структуре не обнаружен.

модели олигомеров с ионами натрия и хлора, связанными с молекулой лизоцима; модели только с ионами натрия, связанными с лизоцимом; олигомеры без связанных с белком ионов. Показано, что в случае олигомеров (димеров и октамеров) только при учете всех связанных с белком ионов осадителя NaCl наблюдается соответствие результатов МД экспериментальным температурным исследованиям растворов в условиях кристаллизации тетрагонального лизоцима методом МУРР (разд. 2.2) [79, 80].

В результате установлено, что ионы натрия и хлора, связанные с молекулой лизоцима в кристалле, играют важную роль в формировании кристалла тетрагональной сингонии, а также вносят существенный вклад в обеспечение стабильности основной “единицы роста” – октамера специфической структуры (типа А) (рис. 4).

4. ФОРМИРОВАНИЕ ЛЕНГМЮРОВСКИХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ РАСТВОРОВ ЛИЗОЦИМА В УСЛОВИЯХ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Настоящий раздел посвящен результатам исследований взаимодействия ионов осадителя с белком в слабоупорядоченных системах, а также формированию ленгмюровских пленок на основе растворов лизоцима в условиях кристаллизации (кристаллизационных растворов) [89–91].

Исследование такой модельной системы позволило уточнить степень стабильности промежуточной фазы кристаллизации и роль ионов осадителя в образовании такой фазы. Было сделано предположение: если для формирования ленгмюровских монослоев на поверхности жидкости использовать растворы белка с добавлением осадителя, то в процессе формирования монослоя будут принимать участие октамеры, что окажет

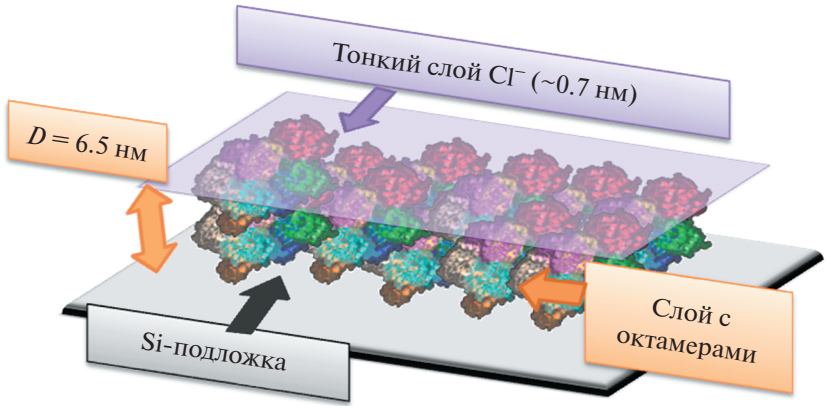


Рис. 9. Схема пленки лизоцима, полученной модифицированным методом ЛШ, построенная на основе данных исследования СРВ в ПВО.

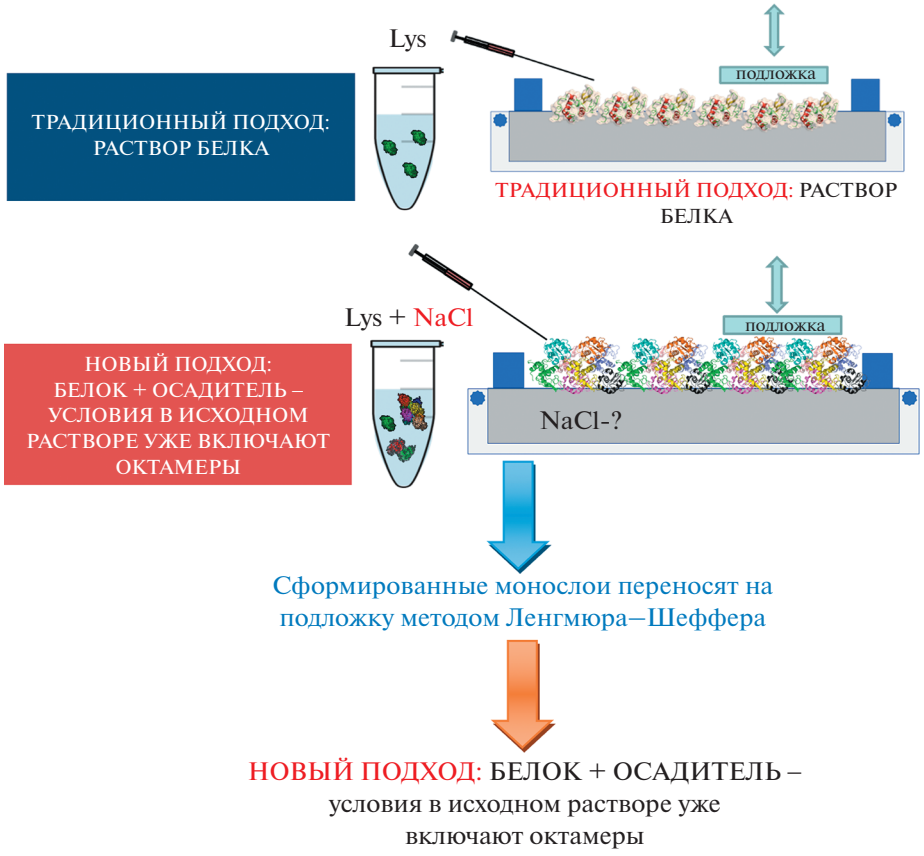


Рис. 10. Схема, иллюстрирующая предложенный способ получения упорядоченных пленок белка на твердых подложках.

влияние на структуру полученных пленок. Данное предположение подтвердили экспериментально. Методами РР, СРВ в ПВО и АСМ показано, что при формировании ленгмюровского монослоя из раствора белка лизоцима с добавлением осадителя NaCl на подложке образуется сплошная однородная пленка толщиной ~6.5 нм, что соответствует усредненному диаметру октамера [89] (рис. 9).

По результатам [89] разработана новая модификация метода Ленгмюра–Шеффера (**ЛШ**) для получения белковых пленок на твердых подложках, основанная на использовании кристаллизационного раствора лизоцима, содержащего октамеры, для формирования монослоя на поверхности водной субфазы [92] (рис. 10).

В [90] представлены результаты структурных исследований пленок лизоцима, полученных при

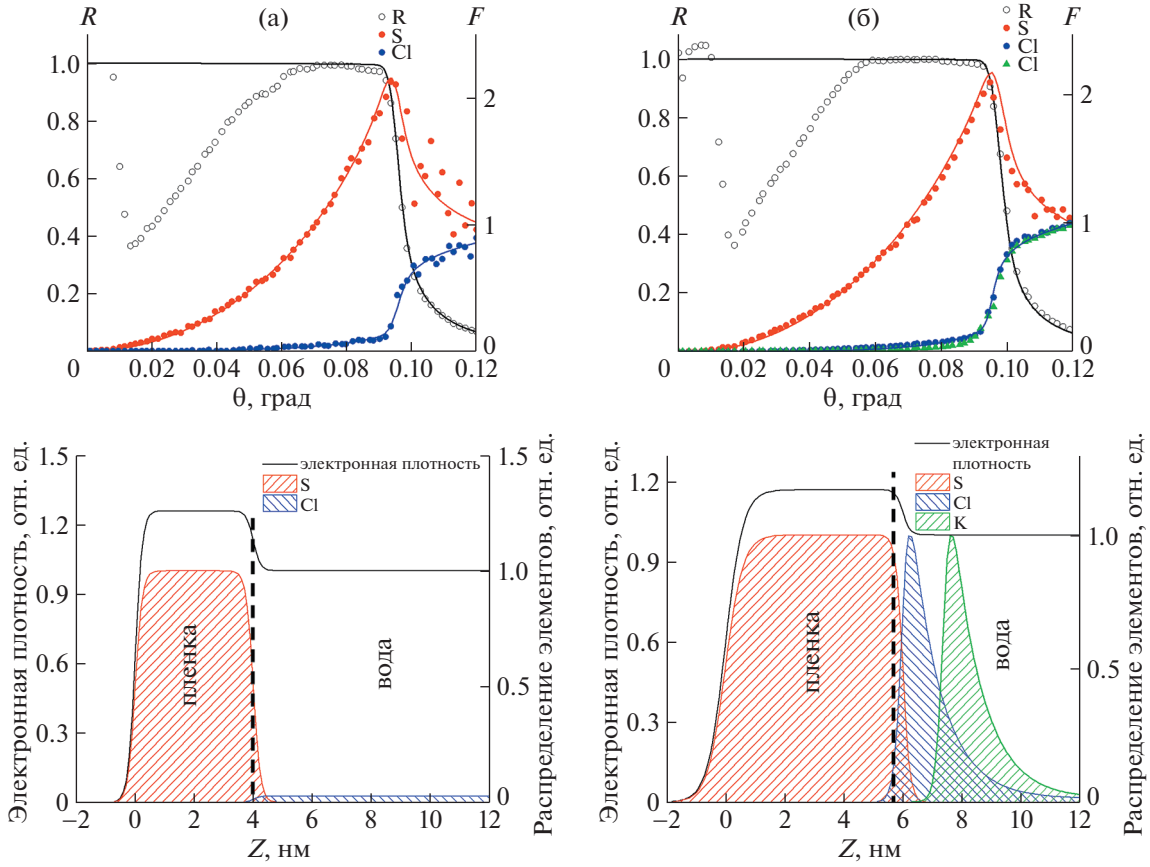


Рис. 11. Угловые зависимости зеркальной компоненты рентгеновского отражения (*R*) и выхода рентгеновской флуоресценции (*F*) (сверху) и соответствующие профили распределения электронной плотности и химических элементов K, Cl, S по толщине слоя (снизу). Ленгмюровский слой, сформированный из раствора лизоцима без осадителя, толщина слоя лизоцима составляет ~3 нм (а). Ленгмюровский слой, сформированный из раствора лизоцима с осадителем, толщина слоя лизоцима составляет ~6 нм (б).

добавлении осадителя KI, методами РР и СРВ в ПВО. В данном случае, когда условия соответствуют образованию кристаллов моноклинной сингонии, показано, что толщина полученной пленки белка составляет ~3 нм, а электронная плотность в 4 раза превышает плотность, рассчитанную для пленки, сформированной из раствора чистого белка, при этом ионы осадителя формируют над поверхностью пленки тонкие слои, образуя слоистую (многослойную) структуру.

Результаты исследований процесса формирования ленгмюровского монослоя на поверхности водной субфазы непосредственно в ленгмюровской ванне методом СРВ в ПВО [91] показали, что уже на поверхности субфазы формируется монослой толщиной в две молекулы, что соответствует тому, что в формировании монослоя принимают участие октамеры лизоцима (рис. 11). Показано, что под монослоем образуется тонкий слой ионов хлора и калия. При этом структура “слой белка/слой осадителя/субфаза” остается стабильной в течение длительного времени (не менее 12 ч в случае KCl) [91]. Отметим, что тонкие “подслои” ионов осадителя, связанные с монослоем белка, сохраняются при переносе белкового монослоя на твердую подложку.

5. СТРУКТУРА ПРЕДКРИСТАЛЛИЗАЦИОННОЙ ФАЗЫ ДЛЯ БЕЛКОВ ПРОТЕИНАЗА К И ТЕРМОЛИЗИН

С целью верификации и распространения предположения о том, что механизм кристаллизации белков включает формирование промежуточной фазы, на другие водорастворимые белки были проведены исследования начальной стадии кристаллизации белков протеиназы К и термолизина [93, 94]. Показано, что при добавлении к раствору протеиназы К сульфата аммония или нитрата натрия в качестве осадителей в растворе образуется существенная доля димеров белка, причем содержание димеров в растворе слабо возрастает с уменьшением температуры [93]. Образование димеров обусловлено тем, что в кристалле именно между димерами наблюдаются наиболее сильные связи, а сами димеры связаны друг с другом слабее (рис. 12).

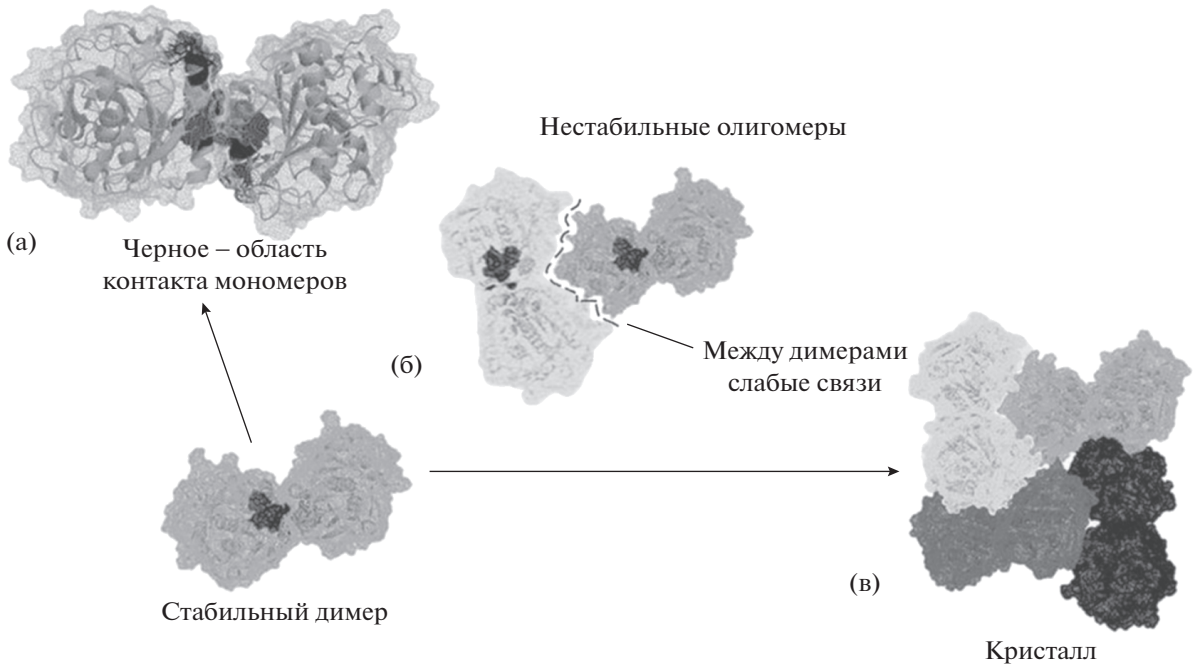


Рис. 12. Структура димера (а) и относительное положение димеров в кристаллической решетке протеиназы К (в). Черным цветом выделена область с наибольшим количеством водородных связей между двумя молекулами белка. Связи между димерами в нестабильных олигомерах (тетрамер, гексамер, октамер) существенно слабее, чем между молекулами в самом димере (б).

В растворе термолизина при добавлении осадителя $(NH_4)_2SO_4$ на начальной стадии кристаллизации обнаружено формирование димеров и гексамеров [94]. При этом количество гексамеров растет при понижении температуры и повышении концентрации осадителя. Кристалл термолизина имеет гексагональную сингонию, и анализ связей между отдельными молекулами в кристалле показал, что наиболее вероятным прекурсором для образования кристалла могут являться димеры и один из двух гексамеров, представленных на рис. 13.

Таким образом, результаты исследования механизмов кристаллизации протеиназы К и термолизина еще раз подтвердили, что образование олигомеров в растворе на начальной стадии кристаллизации обусловлено определенным для каждого белка и осадителя взаимодействием между молекулами белка и ионами, обеспечивающим формирование прекурсоров определенного типа и дальнейшую “сборку” из них кристалла.

Образование в растворе белка прекурсоров – олигомеров определенного типа, являющихся элементами будущего кристалла, – представляет собой дополнительную промежуточную фазу между беспорядком молекул белка в растворе и упорядоченным кристаллом. Взаимодействия между отдельными молекулами белка, которые возникают при добавлении осадителя, приводят к образованию таких прекурсоров, процентное содержание которых в свою очередь взаимосвязано с условиями, способствующими росту кристалла.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены результаты исследований, посвященных разработке научных основ перехода вещества из жидкой фазы в кристаллическую, предложенные и экспериментально подтвержденные коллективом авторов под руководством члена-корреспондента РАН, профессора М.В. Ковальчука. В основе полученных результатов лежит изучение формирования предкристаллизационной фазы – образования кластеров-прекурсоров на атомно-молекулярном уровне на начальной стадии построения кристалла.

Ключевое значение в изучении принципов и механизмов атомно-молекулярной организации материи имеют рентгеновские, синхротронные и нейтронные методы кристаллографии. В основе этих методов лежит определение атомарной структуры органических и неорганических веществ, которая однозначным образом определяет связи составных элементов данных веществ и описывает их взаимодействие, как внутренние взаимодействия в субъединицах (например, в олигомерах в белковых кристаллах), так и внешние взаимодействия между ними в кристаллической надмолекулярной структуре.

Под руководством М.В. Ковальчука разработан принципиально новый научно-методический подход и получены прорывные результаты, основанные на изучении формирования предкристаллизационной фазы, – образования кластеров-прекурсоров, 3D-фрагментов будущей структуры

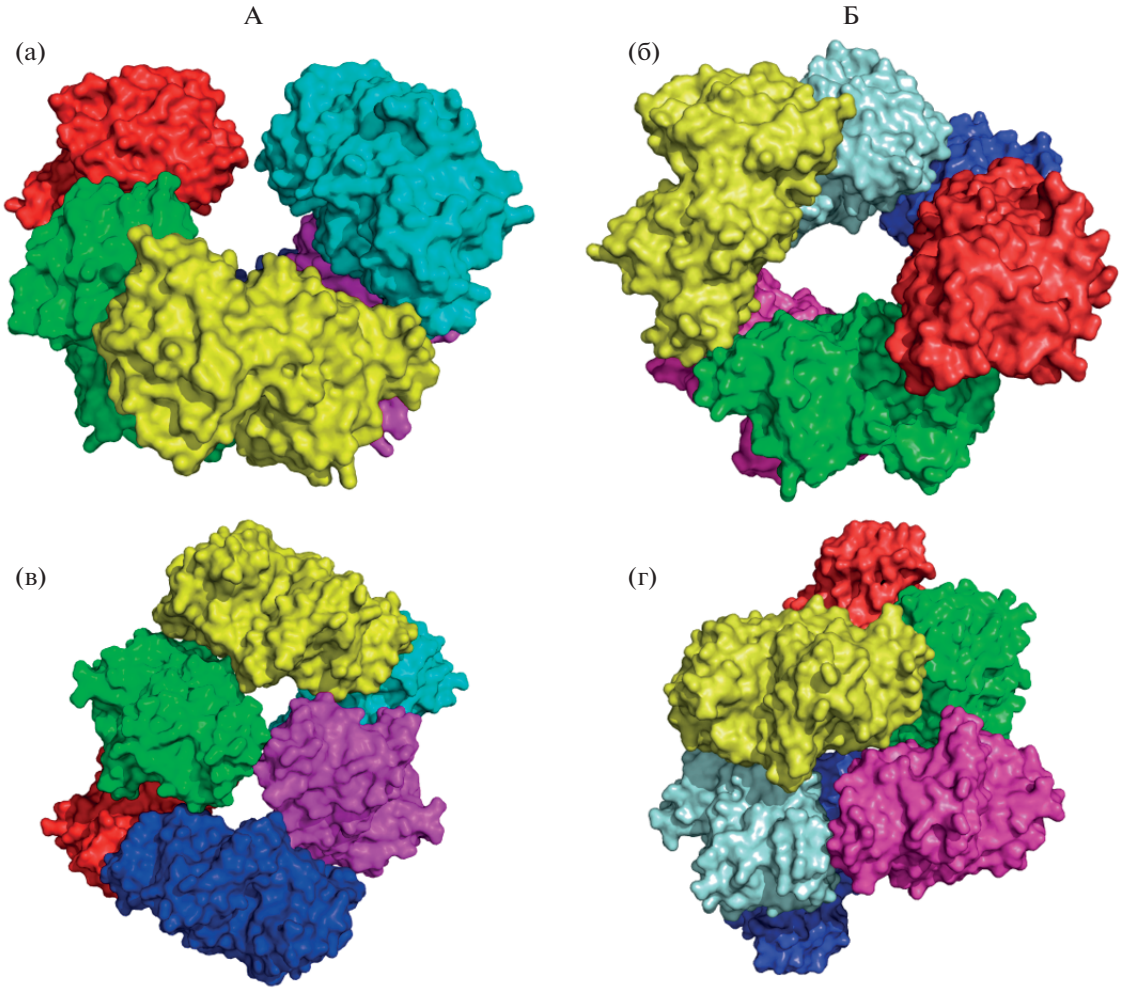


Рис. 13. Возможные типы А (а, в) и Б (б, г) гексамеров, смоделированные на основе анализа кристаллической решетки термолизина. В верхнем (а, б) и нижнем (в, г) рядах гексамеры показаны в двух взаимно перпендикулярных направлениях.

кристалла, на начальной стадии атомно-молекулярной организации системы в упорядоченную кристаллическую структуру.

Полученные в работе фундаментальные знания о механизмах самоорганизации белковых молекул позволят разработать принципиально новые подходы к управляемому получению белковых кристаллов и упорядоченных систем.

На основе полученных в работе фундаментальных результатов по изучению процессов самоорганизации белков предложен новый подход к формированию упорядоченных белковых пленок как основы для создания биоподобных устройств – как биосенсоров (основанных на биохимических процессах в живых организмах), так и элементов биоэлектроники, принцип действия которых приближен к нервной системе.

Предложенный в работе метод ускоренного подбора условий кристаллизации и полученные результаты составляют основу для формирования технологических процессов дизайна и создания новых лекарственных средств, а также ферментов и других макромолекул для сельского хозяйства, промышленной биотехнологии, создания новых материалов.

Предложенный в работе новый комплексный подход, основанный на применении синхротронных и нейтронных методов, а также молекулярного моделирования, к исследованию механизмов формирования упорядоченных белковых систем позволит сформировать методическую базу метрологии принципиально новых природоподобных технологических процессов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Финкельштейн А.В., Птицын О.Б.* Физика белка: Курс лекций с цветными и стереоскопическими иллюстрациями и задачами. 3-е изд. М.: КДУ, 2012. 456 с.
2. *Ковальчук М.В., Попов В.О.* // Наука в России. 2013. № 3. С. 4.
3. *Dauter Z., Dauter M., de La Fortelle E. et al.* // J. Mol. Biol. 1999. V. 289. № 1. P. 83. https://doi.org/10.1006/jmbi.1999.2743

4. *Boue F., Lefaucheux F., Robert M.C. et al.* // J. Cryst. Growth. 1993. V. 133. № 3–4. P. 246. https://doi.org/10.1016/0022-0248(93)90161-O
5. *Ducruix A.F., Guilloteau J.-P., Ries-Kautt M.M., Tardieu A.* // J. Cryst. Growth. 1996. V. 168. № 1–4. P. 28. https://doi.org/10.1016/0022-0248(96)00359-4
6. *Kovalchuk M.V., Kazimirov A.Yu., Zheludeva S.I.* // Nuclear Instrum. Methods Phys. Res. 1995. V. 101. № 4. P. 435. https://doi.org/10.1016/0168-583X(95)00377-0
7. *Zheludeva S.I., Kovalchuk M.V., Novikova N.N.* // Spectrochim. Acta. B. 2001. V. 56. № 11. P. 2019. https://doi.org/10.1016/S0584-8547(01)00314-7
8. *Ковальчук М.В., Кон В.Г.* // Успехи физ. наук. 1986. Т. 149. № 5. С. 69. https://doi.org/10.3367/UFNr.0149.198605c.0069
9. *Kovalchuk M.V., Zheludeva S.I., Novikova N.N. et al.* // J. Appl. Cryst. 1997. V. 30. № 5. P. 833. https://doi.org/10.1107/S0021889897001167
10. *Kovalchuk M.V., Zheludeva S.I., Novikova N.N. et al.* // Mater. Sci. Eng. C. 2003. V. 23. № 5. P. 567. https://doi.org/10.1016/S0928-4931(03)00048-1
11. *Kovalchuk M.V., Novikova N.N., Stepina N.D. et al.* // J. Surf. Invest. X-ray Synchrotron Neutron Tech. 2011. V. 5. № 5. P. 816. https://doi.org/10.1134/S1027451011090126
12. *Ковальчук М.В., Квардаков В.В., Корчуганов В.Н.* // Природа. 2013. № 12. С. 25.
13. *Ковальчук М.В., Квардаков В.В.* // Вопросы атомной науки и техники: Серия: Материаловедение и новые материалы. 2004. № 2 (63). С. 392.
14. *Куранова И.П., Ковальчук М.В.* // Природа. 2014. № 3. С. 12.
15. http://ckp.nrcki.ru/
16. http://kcsni.nrcki.ru/pages/main/sync/beamlines/index.shtml
17. http://rc.nrcki.ru/pages/main/nanozond/facilities/index.shtml#3
18. http://rc.nrcki.ru/pages/main/molbiotech/facilities/index.shtml#3
19. *Желудева С.И., Новикова Н.Н., Коновалов О.В. и др.* // Кристаллография. 2003. Т. 48. № 6. С. 30.
20. *Желудева С.И., Ковальчук М.В., Новикова Н.Н. и др.* // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. № 20. С. 49.
21. *Zheludeva S.I., Kovalchuk M.V., Novikova N.N. et al.* // J. Phys. D. 1993. V. 26. P. A206.
22. *Карайченцев В.Г., Ковальчук М.В., Кузнецов М.Г. и др.* // Приборы и техника эксперимента. 2011. № 3. С. 33.
23. *Серегин А.Ю., Дьякова Ю.А., Якунин С.Н. и др.* // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 6. С. 940. https://doi.org/10.7868/S0023476113060210
24. *Korneev V.N., Shlektarev V.A., Zabelin A.V. et al.* // J. Surf. Invest. X-ray Synchrotron Neutron Tech. 2012. V. 6. № 5. P. 849. https://doi.org/10.1134/S1027451012100084
25. *Peters G.S., Zakharchenko O.A., Konarev P.V. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2019. V. 945. № 21. P. 162616. https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.162616
26. *Попов А.М., Бойкова А.С., Волков В.В. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 5. С. 697. https://doi.org/10.1134/S0023476118050235
27. *Ковальчук М.В., Писаревский Ю.В., Волков В.В. и др.* Микрофлюидная ячейка для определения условий кристаллизации белков методом малоуглового рассеяния. Патент на полезную модель № 182997.
28. *Ковальчук М.В., Просеков П.А., Марченкова М.А. и др.* // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 5. С. 749. https://doi.org/10.7868/S0023476114050105
29. *Дьякова Ю.А., Марченкова М.А.* // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 5. С. 718. https://doi.org/10.7868/S0023476116050064
30. *Свергун Д.И., Фейгин Л.А.* Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986. 280 с.
31. *Бекренев А.Н., Миркин Л.И.* Малоугловая рентгенография деформации и разрушения материалов. М.: МГУ, 1991. 247 с.
32. *Glatter O., Kratky O.* Small-Angle X-ray Scattering. London: Academic Press Inc. Ltd, 1982. 515 p.
33. *Guinier A., Fournet G.* Small-Angle Scattering of X-Rays. New York: John Wiley & Sons, Inc, 1955. 268 p.
34. *Могилевский Л.Ю., Дембо А.Т., Свергун Д.И. и др.* // Кристаллография. 1984. Т. 29. Вып. 3. С. 587.
35. *Pernot P., Round A., Barrett R. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2013. V. 20. P. 660. https://doi.org/10.1107/S0909049513010431
36. *Round A., Felisaz F., Fodinger L. et al.* // Acta Cryst. D. 2015. V. 71. P. 67. https://doi.org/10.1107/S1399004714026959
37. *Kuklin A.I., Islamov A.K., Gordeliy V.I.* // Neutron News. 2005. V. 16. № 3. P. 16. https://doi.org/10.1080/10448630500454361
38. *Emsley P., Lohkamp B., Scott W.G., Cowtan K.* // Acta Cryst. D. 2010. V. 66. № 4. P. 486. https://doi.org/10.1107/S0907444910007493
39. *Schrodinger L.L.C.* The PyMOL Molecular Graphics System, Version 1.8. 2015. http://pymol.org/
40. *Konarev P.V., Petoukhov M.V., Volkov V.V. et al.* // J. Appl. Cryst. 2006. V. 39. № 2. P. 277. https://doi.org/10.1107/S0021889806004699
41. ГОСТ Р 8.698–2010. Государственная система обеспечения единства измерений. Размерные параметры наночастиц и тонких пленок. Методика выполнения измерений с помощью малоуглового рентгеновского дифрактометра. М.: Стандартинформ, 2010. 41 с.
42. *Brennich M.E., Kieffer J., Bonamis G. et al.* // J. Appl. Cryst. 2016. V. 49. P. 203. https://doi.org/10.1107/S1600576715024462
43. *Konarev P.V., Volkov V.V., Sokolova A.V. et al.* // J. Appl. Cryst. 2003. V. 36. P. 1277. https://doi.org/10.1107/S0021889803012779
44. *Petoukhov M.V., Franke D., Shkumatov A.V. et al.* // J. Appl. Cryst. 2012. V. 45. P. 342. https://doi.org/10.1107/S0021889812007662
45. *Soloviev A.G., Solovieva T.M., Stadnik A.V. et al.* SAS. Package for Small-Angle Neutron Scattering Data Treatment, v.2.4. 2003. http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/sas/indexe.html
46. *Svergun D.I., Richard S., Koch M.H.J. et al.* // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1998. V. 95. P. 2267. https://doi.org/10.1073/pnas.95.5.2267
47. *Baitan D., Schubert R., Meyer A. et al.* // JoVE. 2018. № 138. P. e57070. https://doi.org/10.3791/57070
48. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1989. 385 p.

49. *Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В. и др.* // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2003. Т. 34. № 2. С. 472.
50. *Кордонская Ю.В., Тимофеев В.И., Дьякова Ю.А. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 6. С. 902. https://doi.org/10.1134/S002347611806019X
51. *Van Der Spoel D., Lindahl E., Hess B. et al.* // J. Comput. Chem. V. 26. № 16. P. 1701. https://doi.org/10.1002/jcc.20291
52. *Lindorff-Larsen K., Piana S., Palmo K. et al.* // Proteins. 2010. V. 78. № 8. P. 1950. https://doi.org/10.1002/prot.22711
53. http://kcsni.nrcki.ru/pages/main/sync/beamlines/belok/index.shtml
54. http://kcsni.nrcki.ru/pages/main/sync/beamlines/rsa/index.shtml
55. *Battye T.G.G., Kontogiannis L., Johnson O. et al.* // Acta Cryst. D. 2011. V. 67. P. 271. https://doi.org/10.1107/S0907444910048675
56. *McCoy A.J., Grosse-Kunstleve R.W., Adams P.D. et al.* // J. Appl. Cryst. 2007. V. 40. P. 658. https://doi.org/10.1107/S0021889807021206
57. *Vagin A.A., Steiner R.A., Lebedev A.A. et al.* // Acta Cryst. D. 2004. V. 60. № 12. P. 2184. https://doi.org/10.1107/S0907444904023510
58. *Blodgett K.B., Langmuir I.* // Phys. Rev. 1937. V. 51. № 11. P. 964. https://doi.org/10.1103/PhysRev.51.964
59. *Peng J.B., Barnes G.T., Gentle I.R.* // Adv. Colloid Interface Sci. 2001. V. 91. № 2. P. 163. https://doi.org/10.1016/S0001-8686(99)00031-7
60. *Langmuir I., Schaefer V.J.* // J. Am. Chem. Soc. 1938. V. 60. № 11. P. 2803. https://doi.org/10.1021/ja01278a074
61. *Leblanc R.M., Huo Q.* // Encyclopedia of Surface and Colloid Science, Third Edition. CRC Press, 2015. P. 3545.
62. *Pechkova E., Innocenzi P., Malfatti L. et al.* // Langmuir. 2007. V. 23. № 3. P. 1147. https://doi.org/10.1021/la061970o
63. *Bertoncello P., Nicolini D., Paternolli C. et al.* // IEEE Trans. Nanobiosci. 2003. V. 2. № 2. P. 124. https://doi.org/10.1109/tnb.2003.813940
64. *Ковальчук М.В., Бойкова А.С., Дьякова Ю.А. и др.* // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 4. С. 650. https://doi.org/10.7868/S0023476117040129
65. *Schneck E., Papp-Szabo E., Quinn B.E. et al.* // J. R. Soc. Interface. 2009. V. 6. P. 671. https://doi.org/10.1098/rsif.2009.0190.focus
66. *Nguyen L-T.T., Musser A.J., Vorenkamp E.J. et al.* // Langmuir. 2010. V. 17. P. 14073. https://doi.org/10.1021/la100374j
67. *Cristofolini L., Berzina T., Erokhin V. et al.* // Colloids Surf. A. 2008. V. 321. P. 158. https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2007.12.040
68. *Pedersen J.S., Hamley I.W.* // J. Appl. Cryst. 1994. V. 27. № 1. P. 36. https://doi.org/10.1107/S0021889893006272
69. *Ghose S.K., Dev B.N.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. № 24. P. 245409. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.245409
70. *Zegenhagen J.* // Surf. Sci. Rep. 1993. V. 18. P. 202. https://doi.org/10.1016/0167-5729(93)90025-K
71. *Batterman B.W., Cole H.* // Rev. Mod. Phys. 1964. V. 36. № 3. P. 681. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.36.681
72. *Novikova N.N., Yurieva E.A., Zheludeva S.I. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2005. V. 12. № 4. P. 511. https://doi.org/10.1107/S0909049505013579
73. *Parratt L.* // Phys. Rev. 1954. V. 95. № 2. P. 359. https://doi.org/10.1103/PhysRev.95.359
74. *Кон В.Г.* // Кристаллография. 2006. Т. 51. № 5. С. 1001.
75. http://kcsni.nrcki.ru/pages/main/12016/12076/12083/index.shtml
76. *Кон В.Г., Просеков П.А., Серегин А.Ю. и др.* // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 1. С. 29. https://doi.org/10.1134/S0023476119010144
77. http://kcsni.nrcki.ru/pages/main/sync/beamlines/langmuir/index.shtml
78. *Марченкова М.А., Волков В.В., Благов А.Е. и др.* // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 1. С. 14. https://doi.org/10.7868/S0023476116010148
79. *Kovalchuk M.V., Blagov A.E., Dyakova Yu.A. et al.* // Cryst. Growth Des. 2016. 16. № 4. P. 1792. https://doi.org/10.1021/acs.cgd.5b01662
80. *Дьякова Ю.А., Ильина К.Б., Конарев П.В. и др.* // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 3. С. 364. https://doi.org/10.1134/S0023476119010156
81. *Boikova A.S., Dyakova Y.A., Ilina K.B. et al.* // Acta Cryst. D. 2017. V. 73. P. 591. https://doi.org/10.1107/S2059798317007422
82. *Бойкова А.С., Дьякова Ю.А., Ильина К.Б. и др.* // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 6. С. 876. https://doi.org/10.7868/S0023476117060078
83. *Кордонская Ю.В., Тимофеев В.И., Дьякова Ю.А. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 6. С. 902. https://doi.org/10.1134/S002347611806019X
84. *Ковальчук М.В., Писаревский Ю.В., Благов А.Е и др.* Способ определения условий кристаллизации белков. Патент № 2626576.
85. *Дьякова Ю.А., Бойкова А.С., Ильина К.Б. и др.* // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 1. С. 15. https://doi.org/10.1134/S0023476119010065
86. *Marchenkova M.A., Kuranova I.P., Timofeev V.I. et al.* // J. Biomol. Struct. Dyn. 2020. V. 38. № 17. P. 5159. https://doi.org/10.1080/07391102.2019.1696706
87. *Kordonskaya Y.V., Marchenkova M.A., Timofeev V.I. et al.* // J. Biomol. Struct. Dyn. 2021. V. 39. № 18. P. 7223. https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1803138
88. *Hyde A.M., Zultanski S.L., Waldman J.H. et al.* // Org. Process Res. Dev. 2017. V. 21. P. 1355. https://doi.org/10.1021/acs.oprd.7b00197
89. *Ковальчук М.В., Бойкова А.С., Дьякова Ю.А. и др.* // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 4. С. 650. https://doi.org/10.7868/S0023476117040129
90. *Бойкова А.С., Дьякова Ю.А., Ильина К.Б. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 5. С. 703. https://doi.org/10.1134/S0023476118050065
91. *Kovalchuk M.V., Boikova A.S., Dyakova Y.A. et al.* // Thin Solid Films. 2019. V. 677. P. 13. https://doi.org/10.1016/j.tsf.2019.02.051
92. *Ковальчук М.В., Писаревский Ю.В., Дьякова Ю.А. и др.* Заявка на патент “Способ получения упорядоченных белковых пленок на твердых подложках в ленгмюровской ванне”. Патент № 2672410.
93. *Ковальчук М.В., Бойкова А.С., Дьякова Ю.А. и др.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 6. С. 857. https://doi.org/10.1134/S0023476118060061
94. *Kovalchuk M.V., Boikova A.S., Dyakova Y.A. et al.* // J. Biomol. Struct. Dyn. 2019. V. 37. № 12. P. 3058. https://doi.org/10.1080/07391102.2018.1507839

EDN: ORGXJO
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 5, с. 850–858

УДК 548.73

РАЗДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФОТОИНДУЦИРОВАННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ С ПОМОЩЬЮ ВРЕМЯРАЗРЕШАЮЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

© 2022 г. Ф. С. Пиляк[1,*], А. Г. Куликов[1,2], Ю. В. Писаревский[1,2], А. Е. Благов[1,2], М. В. Ковальчук[1,2]

[1] Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия
[2] Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия
**E-mail: FPilyak@yandex.ru*

Поступила в редакцию 14.02.2022 г.
После доработки 25.03.2022 г.
Принята к публикации 25.03.2022 г.

Отмечено разнообразие эффектов, приводящих к деформации кристаллов при освещении. Предложен методический подход к исследованию процессов формирования фотоиндуцированных деформаций в кристаллах без центра симметрии, основанный на применении времяразрешающих рентгенодифракционных методик. С помощью экспериментальных измерений с миллисекундным временным разрешением, дополненных математическими расчетами, разделены вклады пьезофотовольтаического и пироэлектрического эффектов, теплового расширения и оптического выпрямления в общую картину деформаций кристалла при освещении. Определены ключевые параметры описанных деформационных вкладов для их эффективного применения.

DOI: 10.31857/S0023476122050125

ВВЕДЕНИЕ

Одним из перспективных направлений в микроэлектронике является стрейнтроника, в основе которой лежит управление функциональными свойствами материалов при помощи деформаций [1]. Например, активно создаются прототипы энергоэффективных элементов компьютерной памяти, использующие пьезоэлектрическую деформацию в многослойных структурах для управления намагниченностью [2, 3].

В настоящее время разрабатываются и применяются различные способы создания деформаций, основанные на внешних электрических [4] и магнитных воздействиях [5]. Один из многообещающих подходов основан на создании деформаций с помощью оптического воздействия и позволяет добиться высокой степени локализации и скорости формирования деформаций [6].

Большой интерес вызывает возможность создания фотоиндуцированных деформаций с помощью комбинации фотовольтаического и пьезоэлектрического эффектов. Так, в [7, 8] по изменению рентгеновских дифракционных картин в кристаллах $LiNbO_3$: Fe при освещении регистрировались деформации величиной до $\sim 3 \times 10^{-4}$ со временем формирования в несколько десятков минут. Имеющиеся на тот момент методические и инструментальные ограничения не позволили провести детальный анализ механизмов формирования деформаций. В [9] исследовано пространственное распределение фотоиндуцированных деформаций с минутным временным разрешением в том же кристалле с использованием синхротронного излучения. При этом временное разрешение применяемой методики не позволяет обнаружить возможное наличие более быстрых деформационных процессов. В [10] проведены исследования фотоиндуцированных деформаций в $LiNbO_3$: Fe с помощью времяразрешающих рентгенодифракционных методов, при этом удалось выделить сразу несколько быстропротекающих процессов секундной и субсекундной динамики. Полученные результаты показывают, что при освещении могут наблюдаться различные типы деформаций (по величине и времени формирования), каждый из которых может найти свое применение, однако более детального анализа механизмов формирования фотоиндуцированных деформаций проведено не было.

В настоящей работе отмечено разнообразие эффектов, способных вызывать деформации в нецентросимметричных кристаллах при воздействии лазерного излучения. Проведено разделение вкладов фотоиндуцированных эффектов в общую картину деформаций по времени протека-

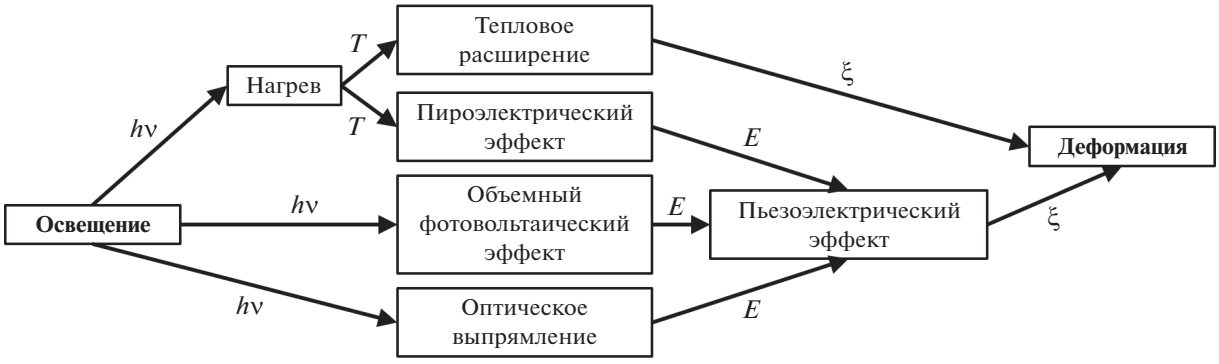


Рис. 1. Схематическое представление процессов формирования деформаций ξ в нецентросимметричных кристаллах при освещении; $h\nu$ – энергия квантов света, T – температура, E – электрическое поле.

ния. На примере $LiNbO_3$: Fe определена величина возникающих деформаций с помощью комбинации времяразрешающей рентгеновской дифрактометрии, электрофизических измерений и теоретических оценок с учетом известных физических констант, определяющих фотовольтаические, пьезоэлектрические, пироэлектрические свойства, а также характеризующих тепловое расширение и эффект оптического выпрямления.

ОСНОВНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ ФОТОИНДУЦИРОВАННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ

Существует множество механизмов формирования фотоиндуцированных деформаций в кристаллических материалах (рис. 1). При высоких интенсивностях лазерное излучение способно приводить к разрушению кристалла. В настоящей работе рассмотрим случай, при котором интенсивность освещения много меньше порогового значения $J \ll J_{\text{порог}}$, характеризующего лучевую прочность материала [11].

Наиболее тривиальным фотоиндуцированным процессом является тепловое расширение кристаллической решетки. В результате нагрева кристалла на величину ΔT в его объеме возникает поле деформаций, характеризуемое тензором второго ранга ξ_{ij}. Тензорные компоненты деформаций в первом приближении определяются как [12]:

$$\xi_{ij} = \alpha_{ij}\Delta T = \alpha_{ij}\frac{J}{c_t}(1 - e^{-\mu l})St, \qquad (1)$$

где α_{ij} – компоненты тензора линейного теплового расширения, J – интенсивность падающего на кристалл лазерного излучения, c_t – удельная теплоемкость кристалла, μ – коэффициент поглощения электромагнитного излучения веществом при данной длине волны освещения, l – толщина кристалла, S – площадь пятна засветки, t – время освещения.

В общем случае возникающее в нецентросимметричных кристаллах электрическое поле E приводит к возникновению деформаций за счет обратного пьезоэлектрического эффекта [12]:

$$\xi_{ij} = d_{ijk}E_k, \qquad (2)$$

где d_{ijk} – тензор пьезоэлектрических коэффициентов.

В результате нагрева и теплового расширения в кристаллах некоторых классов симметрии возникает добавочное значение поляризации и, как следствие, электрическое поле E_{py} – пироэлектрический эффект (рис. 2):

$$E_{py} = -p\frac{\Delta T}{\varepsilon\varepsilon_0} = -p\frac{J}{c_t}\frac{(1 - e^{-\mu l})St}{\varepsilon\varepsilon_0}, \qquad (3)$$

где p – пироэлектрический коэффициент, ε – диэлектрическая проницаемость материала, ε_0 – диэлектрическая постоянная.

Другой механизм формирования фотоиндуцированных деформаций в нецентросимметричных кристаллах связан с объемным фотовольтаическим эффектом (**ОФЭ**) [13]. Данный эффект обусловлен инжекцией носителей заряда (электронов) при поглощении лазерного излучения и формированием электрического поля высокой напряженности (до нескольких кВ/мм) вследствие миграции электронов вдоль полярного направления (рис. 3). При этом происходят термализация электронов и возникновение поляронной проводимости, приводящей к деформации кристалла, которую также следует учитывать. Время термализации электронов составляет ~10^{-14} с [14].

Напряженность электрического поля, формируемого в результате ОФЭ, определяется как

$$E_{sat} = \frac{I}{\sigma} = \frac{\mu GJ}{\sigma_d + \sigma_{ph}(J)}, \qquad (4)$$

где I – плотность фотоиндуцированного тока в кристалле, равная произведению коэффициента

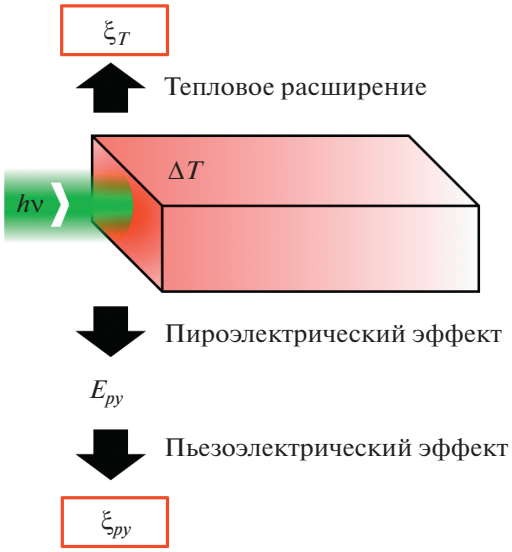


Рис. 2. Схема эффектов, вызываемых нагревом кристалла на ΔT за счет поглощения излучения. Тепловое расширение решетки вызывает деформацию ξ_T. В результате пироэлектрического эффекта возникает добавочное значение поляризации кристалла, формирующее электрическое поле E_{py}, которое в свою очередь вызывает пьезоэлектрическую деформацию ξ_{py}.

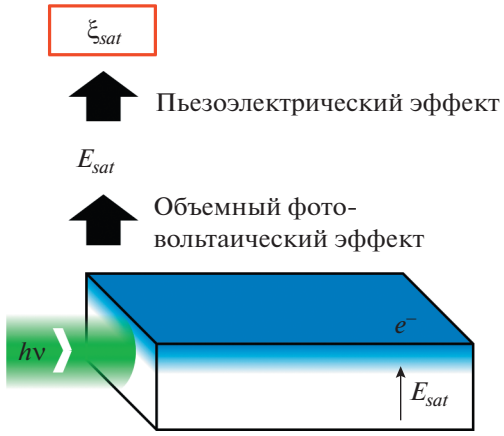


Рис. 3. Схема пьезофотовольтаического эффекта. В результате миграции инжектированных носителей заряда (термализованных e^-), обусловленной объемным фотовольтаическим эффектом, возникает электрическое поле E_{sat}, приводящее к пьезоэлектрической деформации ξ_{sat}.

поглощения, константы Гласса G [15] и интенсивности освещения; σ – проводимость кристалла, являющаяся суммой темновой проводимости σ_d и фотопроводимости σ_{ph}, линейно зависящей от интенсивности освещения [16]. Из конечного выражения видно, что при последовательном повышении интенсивности лазерного излучения напряженность фотоиндуцированного электрического поля будет стремиться к конечному значению [17]. Данный процесс характеризуется временем релаксации Максвелла $\tau_M = \varepsilon\varepsilon_0/\sigma$.

Еще один механизм формирования фотоиндуцированных деформаций, наблюдаемый в нелинейных оптических кристаллах, обусловлен эффектом оптического выпрямления (англ. *optical rectification*), являющимся частным случаем эффекта сложения частоты (рис. 4) [18].

Напряженность электрического поля E_{OR}, образованного в результате эффекта оптического выпрямления, зависит от нелинейных свойств среды и интенсивности падающего излучения:

$$E_{OR} = \frac{\chi^{(0)} E^{(\omega)} E^{(\omega)}}{\varepsilon - 1} = \frac{2J\chi^{(0)}}{cn\varepsilon_0(\varepsilon - 1)}, \qquad (5)$$

где $\chi^{(0)}$ – нелинейная восприимчивость второго порядка для нулевой частоты, $E^{(\omega)}$ – напряженность поля электромагнитной волны с частотой ω, c – скорость света, n – показатель преломления. Время релаксации электронной поляризуемости, ответственной за оптическое выпрямление, связано с характерным временем взаимодействия световой волны со средой и лежит в диапазоне 10^{-16}–10^{-14} с [19].

Учет и разделение вкладов каждого из перечисленных выше эффектов могут быть реализованы совокупностью расчетов и экспериментальных измерений, что требует знания значений соответствующих физических констант и коэффициентов для исследуемого кристалла.

МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Методы рентгеновской дифрактометрии. Измерения при воздействии внешнего электрического поля и лазерного излучения были реализо-

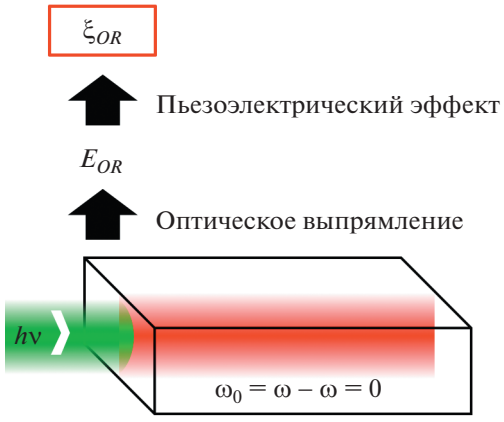


Рис. 4. Схема эффекта оптического выпрямления. В среде с нелинейным откликом оптическое излучение частотой ω приводит к формированию вторичной волны равной частоты. Взаимодействие этих двух волн приводит к образованию электрического поля с разностной частотой ($\omega_0 = 0$) – постоянного электрического поля E_{OR}. Это поле за счет пьезоэлектрического эффекта вызывает деформацию ξ_{OR}.

ваны с помощью метода высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии.

Рентгеновская дифрактометрия представляет собой эффективный инструмент для исследования динамики формирования деформаций в кристаллических материалах в условиях внешних воздействий за счет высокой чувствительности к смещению атомов кристаллической решетки, а также неразрушающего и бесконтактного способа получения информации об объекте. Ранее методы двух- и трехкристальной рентгеновской дифрактометрии хорошо зарекомендовали себя при изучении пьезоэлектрических свойств функциональных кристаллов [20, 21], процессов, вызванных миграцией носителей заряда ионного типа в перспективных материалах [22–24], ультразвуковых нагрузок [25–27], статических и динамических механических воздействий [28, 29].

Метод высокоразрешающей дифрактометрии подразумевает измерение кривых дифракционного отражения (**КДО**) и их последующий анализ. Кривая дифракционного отражения определяется рядом параметров, характеризующих реальную структуру кристалла, таких как форма пика, интегральная интенсивность, полуширина, а также его угловое положение θ_B. Последний параметр, угол Брэгга, зависит от межплоскостного расстояния d.

Возникающие в кристалле деформации могут быть выражены через изменение Δd, измерены путем сканирования КДО соответствующего рефлекса по углу θ и затем количественно определены по смещению дифракционного пика $\Delta\theta$ с учетом известных значений d и длины волны рентгеновского излучения λ [30]:

$$\xi = \frac{\Delta d}{d} = -\operatorname{ctg}\theta_B \Delta\theta = -\Delta\theta\sqrt{\frac{4d^2}{\lambda^2} - 1}. \qquad (6)$$

Для наблюдения динамики формирования деформаций требуется использование рентгенодифракционных методик с соответствующим временным разрешением. Данное временное разрешение достижимо при измерении серии временных зависимостей интенсивности $I(t)$ дифрагированного образцом излучения в условиях импульсного освещения кристалла. Такие временные зависимости записываются для каждого положения образца при угловом сканировании в окрестности угла Брэгга. Полученный трехмерный массив данных “интенсивность–угол–время” $I(\theta, t)$ обрабатывается путем аппроксимации дифракционных пиков для каждого момента времени заданной аналитической функцией, например псевдо-Войта. Полученный результат представляет собой динамику изменения параметров КДО при воздействии лазерного излучения. Данная методика реализуется за счет синхронизации оптической системы возбуждения с многоканальным анализатором детектора. Временное разрешение, достижимое в ходе эксперимента, ограничивается минимальной длительностью канала детектора и интенсивностью падающего рентгеновского пучка и может достигать субмикросекундных значений на лабораторном источнике [31]. Отметим, что описанная времяразрешающая методика применима только в случае, когда изучаемые процессы имеют полностью обратимый характер.

Частная вариация данной методики – измерение интенсивности в одной заданной точке на склоне дифракционного пика [32] – реализуется в режиме постоянной генерации лазерного излучения. Условием применимости такого подхода является стабильность формы КДО в ходе воздействия. Первоначально проводится измерение КДО методом традиционной рентгеновской дифрактометрии для определения ее профиля. Зная первоначальный профиль КДО, по интенсивности дифрагированного излучения в заданной точке кривой восстанавливается положение пика в процессе воздействия. Данная методика позволяет получить временную зависимость положения пика КДО за гораздо меньшее время, что дает преимущество в случае исследования длительных релаксационных процессов. В данной работе, исходя из характерной динамики наблюдаемых процессов и в связи с необходимостью накопления достаточной статистики сигнала, заданное временное разрешение составило 100 мс.

Схема измерений. Исследование процессов формирования фотоиндуцированных деформаций является сложной задачей, требующей ряда предварительных измерений. В первую очередь следует определить электрофизические характеристики экспериментального образца, а именно величины фотоиндуцированного тока и напряжения в исследуемом кристалле, а также его проводимость.

Далее проводятся исследования поведения кристалла при воздействии внешнего электрического поля. Полученные данные позволяют экспериментально определить влияние внешнего электрического воздействия на кристалл, в частности величину пьезоэлектрической деформации и возможные эффекты, вызванные перемещением заряженных дефектов.

Затем проводится ряд исследований при воздействии лазерного излучения методами рентгеновской дифрактометрии, в том числе с временным разрешением. Последующий анализ полученных данных с учетом математических оценок позволяет определить физические процессы, вызывающие деформацию кристаллической решетки, а также разделить их по кинетике протекания.

Рентгенодифракционные измерения были реализованы с помощью экспериментального стенда (рис. 5) на базе трехкристального рентгенов-

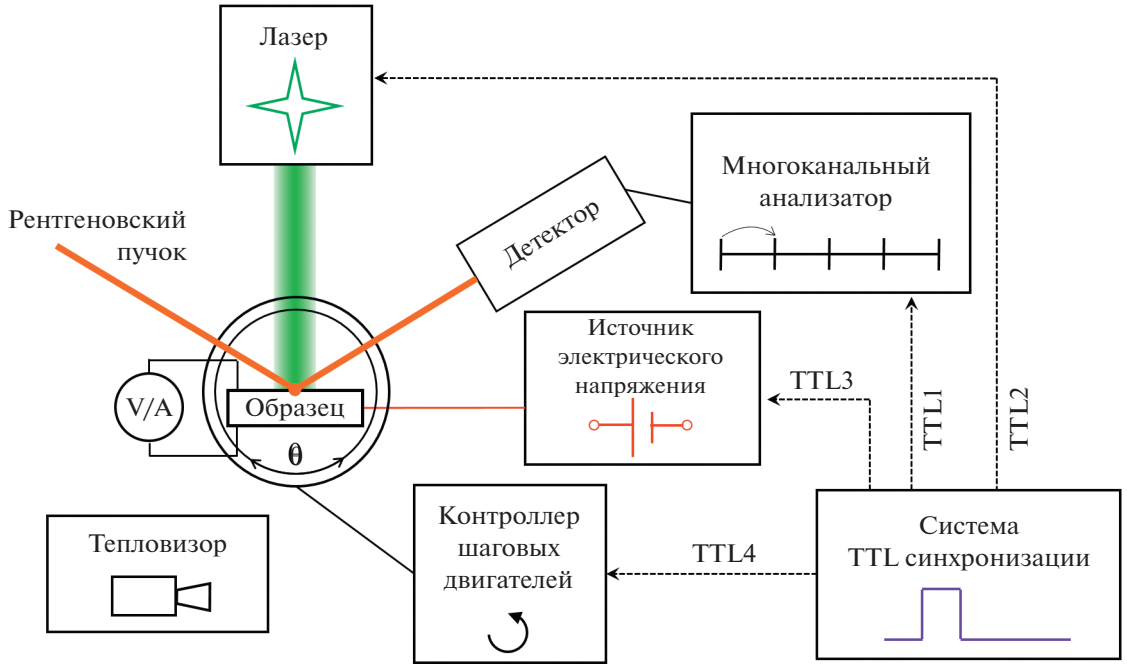


Рис. 5. Принципиальная схема экспериментального стенда для исследования процессов формирования фотоиндуцированных деформаций, включающая в себя основные инструменты для реализации времяразрешающей рентгенодифракционной методики и электрофизических измерений. TTL1–TTL4 – управляющие TTL-сигналы, подаваемые на модули экспериментального стенда для автоматизации экспериментальных измерений.

ского спектрометра (TPC-K) [33]. С помощью кристалла-монохроматора (высокосовершенный монокристалл кремния Si 220) выделяли наиболее интенсивную характеристическую линию с длиной волны $\lambda[MoK_{\alpha 1}] = 0.70932$ Å. Регистрацию рентгеновского излучения осуществляли с помощью детектора Radicon SCSD-4 со скоростью счета 5×10^5 имп/с, подключенного к быстродействующему многоканальному анализатору импульсов ORTEC Easy-MCS с минимальной длительностью канала $\tau_{кан} = 100$ нс. Измерения при воздействии внешнего электрического поля проводили с использованием высоковольтного источника Matsusada AU-5P30-L при напряженности поля $E = 2.00$ кВ/мм. Воздействие лазерным излучением осуществляли с помощью лазерного модуля Lasever LSR-520 (длина волны $\lambda =$ $= 520$ нм, интенсивность $J = 3.4$ Вт/см^2, площадь пятна засветки $S = 3 \times 4$ мм^2). Измерительное оборудование синхронизировали посредством двухканального генератора электрических импульсов Tektronix AFG 3022B.

Проводимость кристалла определяли с помощью источника-измерителя малых величин Keithley 6587 в стандартной схеме измерений при воздействии постоянного электрического поля.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛЬНОГО ОБЪЕКТА ИССЛЕДОВАНИЙ

В качестве экспериментальных образцов использовали плоскопараллельные пластины среза (001) кристалла $LiNbO_3 : Fe$ с концентрацией примеси 0.02% размером 12×12 мм^2 и толщиной 1.33 мм. Синтез кристалла осуществляли по методу Чохральского в условиях воздействия внешнего электрического поля, благодаря чему образцы являлись монодоменными. Подготовленные кристаллические пластины были химически протравлены в 40%-ном растворе плавиковой кислоты при температуре 95°C для удаления нарушенного слоя. На лицевые стороны образцов наносили токопроводящие серебряные контакты. На поверхности была предусмотрена свободная от напыления область диаметром 3 мм под размер лазерного пучка.

Кристалл $LiNbO_3$ обладает ярко выраженными пьезоэлектрическими свойствами. Значения пьезоэлектрических констант, ответственных за деформации по [001]: $d_{33} = 6.0$ пКл/Н, $d_{15} = d_{24} =$ $= 69.2$ пКл/Н [34]. Диэлектрическая проницаемость кристалла составляет $\varepsilon_{33} = 28.5$ [35]. При комнатной температуре для кристалла $LiNbO_3$ характерен поляронный механизм проводимости [36]. Температура Кюри для данного кристалла составляет $T_C = 1157$°C [37]. Удельная электро-

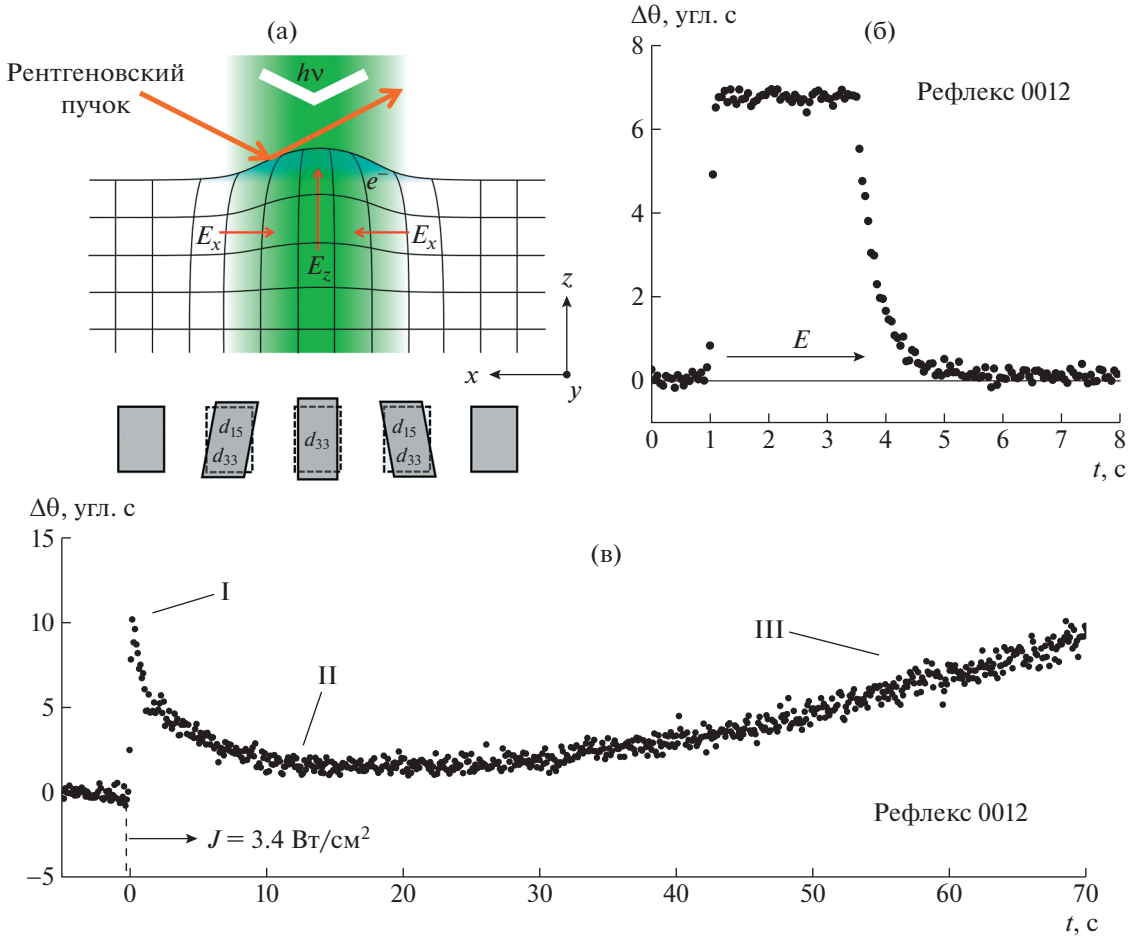


Рис. 6. Результаты измерений деформационного поведения кристалла $LiNbO_3$: Fe методами рентгеновской дифрактометрии: а – принципиальная схема наблюдаемых деформаций за счет компонент электрического поля E_z и E_x, возникающих в кристалле в результате освещения и активации пьезоэлектрических модулей d_{33} и d_{15}; б – относительное смещение КДО на угол Δθ, измеренное методом времяразрешающей рентгеновской дифрактометрии при воздействии внешним импульсным электрическим полем напряженностью $E = 2.00$ кВ/мм; в – сложный профиль временной зависимости смещения КДО (Δθ) в кристалле $LiNbO_3$: Fe при освещении с интенсивностью 3.4 Вт/см^2, вызванный комплексом процессов: I – миграцией носителей заряда (фототоком) и оптическим выпрямлением; II – объемным пьезофотовольтаическим эффектом; III – температурными эффектами (тепловым расширением и пироэлектрическим эффектом).

проводность чистого $LiNbO_3$ составляет 10^{-13}–10^{-12} (Ом м)$^{-1}$, а теплоемкость – $c_t = 628$ Дж/К [38]. Добавление примеси Fe с концентрацией 0.02% не влияет существенно на электропроводность [39]. Коэффициент поглощения $LiNbO_3$: Fe (с концентрацией Fe 0.02%) для излучения с длиной волны 520 нм составляет $\mu = 92.5$ м$^{-1}$ [17]. Константа Гласса равна $G = 1.1 \times 10^{-11}$ м/В [40]. Добавочная компонента проводимости в данном случае зависит от освещения как $\sigma_{ph}(J) = 2.0 \times 10^{-16} J$ [16]. Величина пироэлектрического коэффициента составляет $p = -95.4$ мкКл/(м^2 К) [41]. Коэффициент теплового расширения $\alpha_{33} = 4 \times 10^{-6}$ К$^{-1}$ [42]. Нелинейная восприимчивость второго порядка для направления [001], равная электрооптическому коэффициенту r_{33}, имеет значение $\chi^{(0)} = r_{33} = 31.4$ пм/В [43].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Предварительно измеренная удельная темновая проводимость кристалла составила $\sigma_d = 6.0 \times 10^{-12}$ (Ом м)$^{-1}$.

На рис. 6 представлены временные зависимости положения пика КДО образца. Измерения проведены с использованием рефлекса 0012 с углом Брэгга $\theta_B = 17.878°$ и глубиной экстинкции рентгеновского излучения 3.9 мкм. В ходе измерений поверхность кристалла в области освещения существенно нагревалась. Температура в точке наибольшего нагрева повышалась на $\Delta T = 28$°C за 90 с, выходя на плато.

Воздействие лазерного излучения приводит к сложному деформационному поведению $LiNbO_3$: Fe. Помимо неоднородного распределения тепла за счет локального нагрева и яркого проявления

Таблица 1. Сводные оценки вкладов в величины деформаций различных фотоиндуцированных эффектов, полученные из эксперимента и расчетов, а также характерные времена формирования деформаций

Эффект	Деформация ξ_{33}	Характерное время, с
Оптическое выпрямление + пьезоэлектрический эффект	7.4×10^{-17} [19]	10^{-16}–10^{-14}
Фотоиндуцированный ток поляронов	3.5×10^{-5}*	$<10^{-3}$ [42]
Пьезофотовольтаический эффект	1.3×10^{-5}	19.8
	1.4×10^{-5}*	20–25*
Тепловое расширение	1.12×10^{-4}	
	1.50×10^{-4}**	>30**
Пироэлектрический + пьезоэлектрический эффект	6.3×10^{-5}	
	1.50×10^{-4}**	>30**

Примечания. Деформации указаны для направления [001] (компонента ξ_{33}). Значения без звездочек являются расчетными.

* Значения, определенные экспериментально.

** Экспериментальные значения являются суперпозицией теплового расширения и пироэлектрического эффекта и неотделимы друг от друга.

температурных эффектов при освещении имеет место сложное распределение электрического поля в объеме кристалла вследствие ОФЭ, пироэлектрического эффекта и поля оптического выпрямления, а также градиентное распределение объемного заряда по глубине (рис. 6а). Это вызывает активацию всех имеющихся компонент пьезоэлектрического тензора (в том числе сдвиговых) и сложную неоднородную пьезоэлектрическую деформацию в направлении [001], регистрируемую методами рентгеновской дифракции. Смещение КДО за счет пьезоэлектрической деформации при воздействии внешнего электрического поля напряженностью 2.00 кВ/мм определялось экспериментально (рис. 6б). Наблюдаемую динамику фотодеформаций можно разбить на три участка (рис. 6в): I – скачкообразное мгновенное изменение положения пика; II – более медленное (порядка 20–25 с) смещение пика в сторону меньших углов; III – последующее длительное релаксационное (>100 с) смещение пика в сторону больших углов. Быструю скачкообразную деформацию, согласно проведенным оценкам, может вызывать фототок поляронов. Электрическая поляризация, вызванная поляронным током смещения, связана с деформацией кристаллической решетки посредством сильного пьезоэлектрического взаимодействия [44]. Угловое смещение на участке II обусловлено пьезофотовольтаической деформацией, на что указывает характерное время ~20–25 с [10]. Напряженность фотоиндуцированного электрического поля ОФЭ, ответственного за наблюдаемую пьезофотовольтаическую деформацию, составляет $E_{sat} \approx 2.8$ кВ/мм. Последующее смещение в область больших углов (участок III, рис. 6в) связано с неоднородным распределением тепловых деформаций.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Поскольку тепловое расширение кристаллической решетки и пироэлектрический эффект являются взаимосвязанными эффектами, их не удается разделить по временам протекания. Однако из величины нагрева кристалла можно оценить деформации, вызываемые каждым из эффектов. Исходя из (1) и измеренного приращения температуры, величина деформации, возникающей в результате теплового расширения кристалла, составляет $\xi_{33} = 1.12 \times 10^{-4}$. Экспериментально измеренное характерное время нагрева поверхности кристалла составляет более 30 с. Отметим, что точный расчет скорости нагрева кристалла является нетривиальной задачей, поскольку требует учета множества факторов (теплопроводности, рассеяния излучения внутри кристалла, распределения интенсивности лазерного пучка и т.д.), что выходит за рамки данной работы.

Электрическое поле, возникающее в результате пироэлектрического эффекта при нагреве, в соответствии с (3) достигает $E_{py} = 10.6$ кВ/мм. Напряженность поля, возникающего в результате оптического выпрямления при заданных параметрах освещения, с учетом (5) составляет всего $E_{OR} = 1.2 \times 10^{-5}$ В/м.

Проведенные в соответствии с (4) оценки поля насыщения в результате ОФЭ дают значение $E_{sat} = 2.6$ кВ/мм. Расчетное максвелловское время пьезофотовольтаической деформации за счет ОФЭ составляет $\tau_M = 19.8$ с.

Значения деформаций оценивали с учетом (2). Обработку экспериментальных данных проводили согласно (6). Сводные математические оценки и экспериментальные данные о величинах деформаций, создаваемых фотоиндуцированными процессами, и характерных временах их формирования представлены в табл. 1.

Из полученных результатов видно, что вклад деформаций за счет оптического выпрямления оказывается намного меньше остальных. Отметим, что данный эффект может проявляться сильнее в случае тонких слоев и пленок и при фокусировке лазерного пучка высокой мощности. Наиболее быстрый из экспериментально зарегистрированных процессов предположительно связан с фотоиндуцированным током поляронов, амплитуда которого зависит от фотопроводимости. Экспериментальные и расчетные значения пьезофотовольтаических деформаций хорошо соотносятся между собой. Наибольший вклад в деформационную картину вносят самые медленные тепловые эффекты.

В реальных кристаллах существуют также иные механизмы формирования деформаций, однако их учет выходит за рамки настоящей работы. Так, деформации могут возникать в результате миграции носителей заряда в случае ионной или вакансионной проводимости [45]. Воздействие лазерного излучения на сегнетоэлектрические кристаллы также способно приводить к перестройке доменной структуры [46].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен методический подход для исследования фотоиндуцированных деформаций в кристаллах на основе комбинации математических оценок и экспериментальных измерений методами времяразрешающей рентгеновской дифрактометрии.

На примере сегнетоэлектрического кристалла $LiNbO_3$: Fe продемонстрирована эффективность данного подхода для выделения из общей деформационной картины вкладов независимых составляющих. Впервые проведено разделение нескольких деформационных процессов, обусловленных различными механизмами (тепловыми, электрическими, фотовольтаическими). Определены характерные времена и величины фотоиндуцированных деформаций конкурирующих эффектов. С учетом пространственной локализации и топологии засветки можно выбрать наиболее подходящий эффект для решения соответствующих задач стрейнтроники при разработке электромеханических устройств.

Возможности предлагаемого подхода могут быть существенно расширены при его использовании на высокоинтенсивных источниках синхротронного излучения и лазерах на свободных электронах. В частности, это позволит достичь фемтосекундного временного разрешения и разделить сверхбыстрые деформационные процессы с высокой чувствительностью.

Авторы выражают благодарность Т.Р. Волк за ценные комментарии.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках Государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН в части подготовки образцов кристаллов и в части разработки методического подхода и проведения исследований (грант № 075-15-2021-1362), а также при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-29-12037 мк) в части обработки экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бухараев А.А., Звездин А.К., Пятаков А.П. и др.* // Успехи физ. наук. 2018. Т. 188. № 12. С. 1288. https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.01.038279
2. *Yan H., Feng Z., Shang S. et al.* // Nat. Nanotechnol. 2019. V. 14. P. 131. https://doi.org/10.1038/s41565-018-0339-0
3. *Lei N., Devolder T., Agnus G. et al.* // Nat. Commun. 2013. V. 4. P. 1378. https://doi.org/10.1038/ncomms2386
4. *Ковальчук М.В., Благов А.Е., Куликов А.Г. и др.* // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 6. С. 950. https://doi.org/10.7868/S0023476114060149
5. *Hunter D., Osborn W., Wang K. et al.* // Nat. Commun. 2011. V. 2. P. 518. https://doi.org/10.1038/ncomms1529
6. *Lejman M., Vaudel G., Infante I.C. et al.* // Nat. Commun. 2014. V. 5. P. 4301. https://doi.org/10.1038/ncomms5301
7. *Zhukov S.G., Fetisov G.V., Aslanov L.A.* // J. Appl. Cryst. 1991. V. 24. P. 74. https://doi.org/10.1107/S0021889890010160
8. *Abramov N.A., Voronov V.V., Kuzminov Y.S.* // Ferroelectrics. 1978. V. 22. P. 649. https://doi.org/10.1080/00150197808237356
9. *Calamiotou M., Chrysanthakopoulos N., Papaioannou G. et al.* // J. Appl. Phys. 2007. V. 102. P. 083527. https://doi.org/10.1063/1.2798636
10. *Pilyak F.S., Kulikov A.G., Fridkin V.M. et al.* // Phys. B: Condens. Matter. 2021. V. 604. P. 412706. https://doi.org/10.1016/j.physb.2020.412706
11. *Meng Q., Zhang B., Zhong S., Zhu L.* // Appl. Phys. A. 2016. V. 122. P. 582. https://doi.org/10.1007/s00339-016-0120-x
12. *Шаскольская М.П.* Кристаллография. Учебное пособие для вузов. М.: Высшая школа, 1984. 376 с.
13. *Sturman B.I., Fridkin V.M.* The Photovoltaic and Photorefractive Effects in Noncentrosymmetric Materials. Philadelphia: Gordon and Breach Sci. Publ., 1992. 238 p.
14. *Gu Z., Imbrenda D., Bennett-Jackson A.L. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 118. P. 096601. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.096601
15. *Glass A.M., von der Linde D., Negran T.J.* // Appl. Phys. Lett. 1974. V. 25. P. 233. https://doi.org/10.1063/1.1655453
16. *Gerson R., Kirchhoff J.F., Halliburton L.E. et al.* // J. Appl. Phys. 1986. V. 60. P. 3553. https://doi.org/10.1063/1.337611

17. *Grousson R., Henry M., Mallick S. et al.* // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. P. 3012. https://doi.org/10.1063/1.332504
18. *Mirzaee S.M.A., Nunzi J.-M.* // J. Opt. Soc. Am. B. 2019. V. 36. P. 53. https://doi.org/10.1364/JOSAB.36.000053
19. *Морозов Б.Н., Айвазян Ю.М.* // Квантовая электроника. 1980. Т. 7. С. 5. https://doi.org/10.1070/QE1980v010n01ABEH009843
20. *Благов А.Е., Марченков Н.В., Писаревский Ю.В. и др.* // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 1. С. 51. https://doi.org/10.7868/S0023476113010050
21. *Irzhak D., Roshchupkin D.* // AIP Adv. 2013. V. 3. P. 102108. https://doi.org/10.1063/1.4824636
22. *Kulikov A.G., Blagov A.E., Ilin A.S. et al.* // J. Appl. Phys. 2020. V. 127. P. 065106. https://doi.org/10.1063/1.5131369
23. *Куликов А.Г., Благов А.Е., Марченков Н.В. и др.* // ФТТ. 2020. Т. 62. Вып. 12. С. 2120. https://doi.org/10.21883/FTT.2020.12.50216.087
24. *Марченков Н.В., Куликов А.Г., Аткнин И.И. и др.* // Успехи физ. наук. 2019. Т. 189. № 2. С. 187. https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.06.038348
25. *Благов А.Е., Писаревский Ю.В., Таргонский А.В. и др.* // ФТТ. 2017. Т. 59. Вып. 5. С. 947. https://doi.org/10.21883/FTT.2017.05.44385.367
26. *Mkrtchyan A.R., Blagov A.E., Kocharyan V.R. et al.* // J. Contemp. Phys. (Armenian Acad. Sci.). 2019. V. 54. P. 210. https://doi.org/10.3103/S1068337219020142
27. *Куликов А.Г., Марченков Н.В., Благов А.Е. и др.* // Акуст. журн. 2016. Т. 62. С. 675. https://doi.org/10.7868/S0320791916050087
28. *Элиович Я.А., Аккуратов В.И., Таргонский А.В., Благов А.Е.* // Кристаллография. 2018. Т. 63. № 5. С. 708. https://doi.org/10.1134/S1063774518050097
29. *Элиович Я.А., Аккуратов В.И., Таргонский А.В. и др.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исследования. 2020. № 8. С. 3. https://doi.org/10.31857/S1028096020080075
30. *Bowen D.K., Tanner B.K.* High resolution X-ray diffractometry and topography. London: CRC press, 1998. 252.
31. *Marchenkov N.V., Kulikov A.G., Petrenko A.A. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 2018. V. 89. P. 095105. https://doi.org/10.1063/1.5036955
32. *Annaka S., Nemoto A.* // J. Appl. Cryst. 1977. V. 10. P. 354. https://doi.org/10.1107/S0021889877013624
33. *Ковальчук М.В., Ковьев Э.К., Пинскер З.Г.* // Кристаллография. 1975. Т. 20. Вып. 1. С. 42.
34. *Smith R.T., Welsh F.S.* // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. P. 2219. https://doi.org/10.1063/1.1660528
35. *Kushibiki J., Takanaga I., Arakawa M. et al.* // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control. 1999. V. 46. P. 1315. https://doi.org/10.1109/58.796136
36. *Schmidt F., Kozub A.L., Gerstmann U. et al.* // Crystals. 2021. V. 11. P. 542. https://doi.org/10.3390/cryst11050542
37. *Smolenskii G.A., Krainik N.N., Khuchua N.P. et al.* // Phys. Status Solidi. B. 1966. V. 13. P. 309. https://doi.org/10.1002/pssb.19660130202
38. *Wong K.K.* Properties of lithium niobate. London: IET, 2002. 429 p.
39. *Brands K., Falk M., Haertle D. et al.* // Appl. Phys. B. 2008. V. 91. P. 279. https://doi.org/10.1007/s00340-008-2989-3
40. *Glass A.M., von der Linde D., Auston D.H. et al.* // J. Electron. Mater. 1975. V. 4. P. 915. https://doi.org/10.1007/BF02660180
41. *Popescu S.T., Petris A., Vlad V.I.* // J. Appl. Phys. 2013. V. 113. P. 043101. https://doi.org/10.1063/1.4788696
42. *Блистанов А.А.* Акустические кристаллы. М.: Наука, 1982. 632 с.
43. *De Toro J.A., Serrano M.D., Gabanes A.G. et al.* // Opt. Commun. 1998. V. 154. P. 23. https://doi.org/10.1016/S0030-4018(98)00298-3
44. *Holtz M., Hauf C., Salvador A.A.H. et al.* // Phys. Rev. B. 2016. V. 94. P. 104302. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.104302
45. *Куликов А.Г., Писаревский Ю.В., Благов А.Е. и др.* // ФТТ. 2019. Т. 61. Вып. 4. С. 671. https://doi.org/10.21883/FTT.2019.04.47411.250
46. *Голенищев-Кутузов А.В., Голенищев-Кутузов В.А., Калимуллин Р.И.* // Успехи физ. наук. 2000. Т. 170. № 7. С. 697. https://doi.org/10.3367/UFNr.0170.200007a.0697