

Wniosek

o budowę źródła promieniowania
synchrotronowego w Polsce

i

o utworzenie

**Narodowego Centrum
Promieniowania Synchrotronowego**

czerwiec 2006

Pod redakcją: E.A. Görlich¹, K. Królas¹, K. Tomala¹

Autorzy:

J. Bąk-Misiuk², A. Burian³, M. Danielewski⁴, P. Dereń¹¹, E.A. Görlich¹, M. Grinberg¹², B. Handke²², M. Handke⁴, M. Jaskólski⁵, A. Joachimiak²⁰, Cz. Kapusta⁴, A. Kołodziejczyk⁴, B.J. Kowalski², M. Kozak⁵, K. Królas¹, K. Krop⁴, W.M. Kwiatek⁶, M. Lankosz⁴, K. Lewiński¹, W. Łasocha¹, K. Ławniczak-Jabłońska², B.A. Orłowski², W. Paszkowicz², J. Pełka², S. Pikus²¹, P. Piszora⁵, K. Polewski¹⁵, S. Rabiej¹⁹, M. Rams¹, W. Rypniewski¹⁶, M. Sikora^{4,14}, A. Suchocki², J. Szade³, M. Szczerbowska-Boruchowska⁴, J. Sarzyński²¹, K. Szymański¹³, K. Tomala¹, W. Wierzchowski⁹, K. Wieteska⁷, A. Włochowicz¹⁹, M. Wołczyrz¹¹, D. Zając^{6,18}, M. Zubek¹², E. Żukowski¹³, J. Żukrowski⁴

- 1) Uniwersytet Jagielloński, KRAKÓW
- 2) Instytut Fizyki PAN, WARSZAWA
- 3) Uniwersytet Śląski, KATOWICE,
- 4) Akademia Górniczo-Hutnicza, KRAKÓW
- 5) Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, POZNAŃ
- 6) Instytut Fizyki Jądrowej PAN, KRAKÓW
- 7) Instytut Energii Atomowej, WARSZAWA
- 8) Politechnika Warszawska, WARSZAWA
- 9) Instytut Technologii Materiałów Elektronicznych, WARSZAWA
- 10) Uniwersytet Warszawski, WARSZAWA
- 11) Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, WROCŁAW
- 12) Uniwersytet Gdański, GDAŃSK
- 13) Uniwersytet w Białymstoku, BIAŁYSTOK
- 14) ESRF, GRENOBLE
- 15) Akademia Rolnicza w Poznaniu, POZNAŃ
- 16) DESY/EMBL, HAMBURG
- 17) Politechnika Krakowska, KRAKÓW
- 18) DESY/HASYLAB, HAMBURG,
- 19) Akademia Techniczno-Humanistyczna, BIELSKO-BIAŁA
- 20) APS, CHICAGO
- 21) Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, LUBLIN
- 22) Aarhus University, AARCHUS

Centrum Promieniowania Synchrotronowego (Uniwersytet Jagielloński)

ul. Reymonta 4, 30-059 Kraków

tel. (012) 663 58 20 , (012) 663 55 29
ufgoerli@cyf-kr.edu.pl

fax. (012) 633 70 86
<http://www.if.uj.edu.pl/Synchro/>

Spis treści

1	UZASADNIENIE WNIOSKU	7
2	PROMIENIOWANIE SYNCHROTRONOWE I JEGO ZASTOSOWANIA	8
2.1	Promieniowanie synchrotronowe, jego właściwości i wytwarzanie	8
2.2	Techniki pomiarowe wykorzystujące promieniowanie synchrotronowe i ich zastosowania.....	11
2.3	Zastosowania promieniowania synchrotronowego - podsumowanie.....	22
2.4	Źródła promieniowania synchrotronowego na świecie.....	23
3	KORZYŚCI WYNIKAJĄCE Z POWSTANIA NARODOWEGO CENTRUM PROMIENIOWANIA SYNCHROTRONOWEGO	24
3.1	Naukowe.....	24
3.2	Technologiczne – bezpośrednie i pośrednie.....	24
3.3	Edukacyjne	25
3.4	Społeczne	25
3.5	Rola Narodowego Centrum Badawczego	25
4	OCENA ODDZIAŁYWANIA NA ŚRODOWISKO	26
5	PODSTAWOWE ZAŁOŻENIA TECHNICZNE PROJEKTU	27
5.1	Układy przyspieszające: microtron, booster-synchrotron	28
5.2	Pierścień akumulujący (magazynujący).....	28
5.3	Linie eksperymentalne – etap I	29
5.3.1	<i>Linia M1: Wysokorozdzielcza rentgenowska spektroskopia absorpcyjna i emisyjna w zakresie wysokich energii</i>	<i>29</i>
5.3.2	<i>Linia U1: Rentgenowskie badania dyfrakcyjne</i>	<i>42</i>
5.3.3	<i>Linia W2: Mikroskopia twardego promieniowania X, mikrotomografia.....</i>	<i>61</i>
5.3.4	<i>Linia M3: Linia niskich energii (NIR, Vis, UV, miękkie promieniowanie X)</i>	<i>64</i>
5.3.5	<i>Linia U3: Spektroskopia miękkiego promieniowania X.....</i>	<i>68</i>
5.3.6	<i>Linia M4: Spektroskopia bliskiej i dalekiej podczerwieni, mikroskopia.....</i>	<i>73</i>
5.3.7	<i>Linia U4: Krystalografia białek.....</i>	<i>75</i>
5.4	Linie pomiarowe – przewidywany rozwój.....	77
6	STRONA ORGANIZACYJNA PRZEDSIĘWZIĘCIA	86
6.1	Możliwe formy organizacyjne na poszczególnych etapach realizacji projektu	86
6.2	Wykorzystanie potencjału polskiego przemysłu.....	86
6.3	Wkład polskich naukowców i techników obecnie pracujących za granicą.....	89
6.4	Pomoc ze strony ośrodków zagranicznych	89
7	PROPONOWANA LOKALIZACJA	89
8	PRZEWIDYWANE KOSZTY	91
9	HARMONOGRAM	93
10	BAZA DANYCH PUBLIKACJI Z UDZIAŁEM AUTORÓW POLSKICH	93

1 Uzasadnienie wniosku

W Polsce nie ma dużych urzędzeń badawczych. Polscy naukowcy jeżdżą do zagranicznych ośrodków prowadzić badania naukowe na urządzeniach zbudowanych dzięki decyzjom rządów innych krajów.

Uniwersalnym dużym urządzeniem badawczym jest źródło promieniowania synchrotronowego, które wytwarza promieniowanie elektromagnetyczne charakteryzujące się ogromną intensywnością, szerokim zakresem widmowym rozciągającym się od podczerwieni do promieniowania rentgenowskiego, silną kolimacją wiązki, impulsową strukturą natężenia i zdefiniowanym stanem polaryzacji. Te unikalne parametry pozwalają na wykorzystanie najnowocześniejszych, zaawansowanych metod badawczych często w ogóle nieosiągalnych w samodzielnych stanowiskach laboratoryjnych. Uniwersalność źródła promieniowania synchrotronowego sprawia, że stwarza ono szerokie możliwości badawcze dla wszystkich nauk przyrodniczych i technicznych a także w takich dziedzinach jak medycyna, farmakologia, mineralogia i inżynieria materiałowa.

Na świecie pracuje około 60 synchrotronów a 10 dalszych jest w różnych fazach budowy. Synchrotrony znajdują się w Japonii, USA, krajach Europy Zachodniej i kilku krajach rozwijających się. Dotychczas nie zbudowano takiego urządzenia ani w Polsce ani w sąsiadujących z naszym krajem krajach Europy Środkowo-Wschodniej. Istnieje natomiast silne środowisko polskich naukowców korzystających z synchrotronów pracujących w innych krajach. Są też polscy inżynierowie i fizycy, którzy pracowali przy budowie a potem przy obsłudze synchrotronu.

W kilku krajach, między innymi w Stanach Zjednoczonych niektóre synchrotrony uzyskały status narodowych ośrodków promieniowania synchrotronowego. Stworzone wokół nich centra badawcze silnie oddziałują na działalność naukową w tych krajach.

Przedstawiany wniosek zawiera argumenty za budową w Polsce pierwszego synchrotronu. Zyskał poparcie Towarzystw Naukowych. W jego przygotowaniu wzięło bezpośredni udział ponad 50 autorów z czołowych polskich uniwersytetów i instytutów naukowych reprezentujących takie dyscypliny nauki jak fizyka, chemia, inżynieria materiałowa, biologia i medycyna.

We wniosku proponujemy utworzenie pierwszego w Polsce centrum naukowego wokół dużego urządzenia badawczego. Proponowany do budowy synchrotron ma być najnowocześniejszym urządzeniem spełniającym wszystkie kryteria źródeł promieniowania synchrotronowego trzeciej generacji. Będzie uniwersalnym i nowoczesnym narzędziem do badań naukowych. Polscy naukowcy i studenci będą mieli w kraju lepsze warunki do prowadzenia na poziomie światowym zaawansowanych prac badawczych o charakterze podstawowym i aplikacyjnym. Projekt ten budzi również duże zainteresowanie naukowców z sąsiednich krajów Europy Środkowo-Wschodniej.

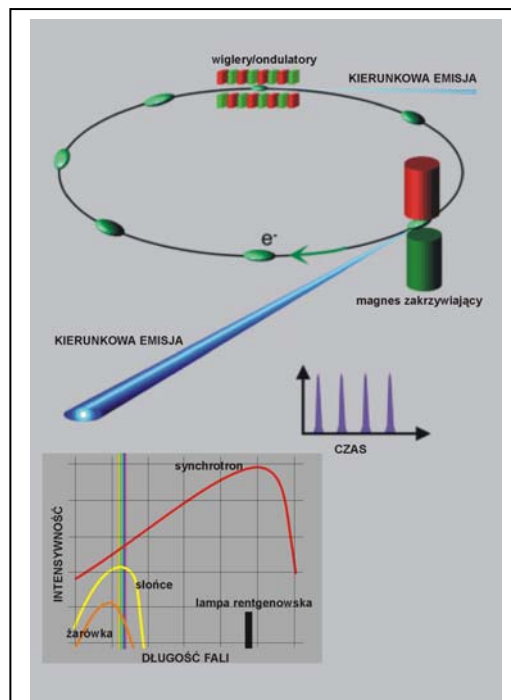
2 Promieniowanie synchrotronowe i jego zastosowania

2.1 Promieniowanie synchrotronowe, jego właściwości i wytwarzanie

Promieniowanie synchrotronowe jest promieniowaniem elektromagnetycznym emitowanym przez poruszającą się z relatywistycznymi prędkościami elektrony lub pozytony, kiedy zmianie ulega kierunek ich ruchu. Emisja promieniowania następuje albo podczas zmiany kierunku ruchu w tzw. magnesach odchylających (zakrzywiających) albo poprzez wymuszenie odpowiedniego, krzywoliniowego ruchu elektronów w specjalnych, dedykowanych urządzeniach, tzw. *insertion devices* (wigglery lub undulatory). Promieniowanie jest emitowane w wąskim stożku wokół kierunku stycznego do orbity poruszającego się elektronu. Kątowa rozwartość tego stożka maleje ze wzrostem prędkości elektronów.

Promieniowanie synchrotronowe wykazuje szereg unikalnych właściwości którymi znacznie przewyższa, zwłaszcza w niektórych obszarach widma, klasyczne źródła promieniowania elektromagnetycznego. Wykazuje ono między innymi następujące cechy:

- **bardzo duże natężenie**, a wobec małego obszaru z którego następuje emisja oznacza to również **nadwyzwyczajną świetlną powierzchnię źródła** (*brightness, brilliance*). W obszarze rentgenowskim widma, jego natężenie o wiele rzędów wielkości przewyższa natężenie promieniowania emitowanego przez konwencjonalne lampy rentgenowskie. Wykazuje także, będącą wynikiem relatywistycznej kinematyki **bardzo dobrą kolimację**, która pozwala na prowadzenie badań lub analizę chemiczną składu materiałów z bardzo dobrą przestrzenną zdolnością rozdzielczą,
- **szeroki zakres spektralny**, rozciągający się od promieniowania w dalekiej podczerwieni o długości fali rzędu $\lambda \cong 10^5 \text{ \AA}$ i energii $E \cong 10^{-1} \text{ eV}$ do twardego promieniowania rentgenowskiego o długości fali $\lambda < 1 \text{ \AA}$ i energii powyżej 10 keV. Ważnym jest, że przy użyciu odpowiednio dobranych monochromatorów lub odpowiednio skonstruowanego undulatora, istnieje możliwość otrzymania bardzo intensywnego promieniowania o określonej długości fali,
- **określoną strukturę czasową**. Ponieważ przyspieszone elektrony poruszają się w przestrzennie rozdzielonych pakietach, promieniowanie synchrotronowe jest emitowane w formie krótkich impulsów, których czas trwania jest zwykle poniżej jednej nanosekundy. Zarówno czas trwania tych impulsów jak i odległość pomiędzy nimi może być w pewnym



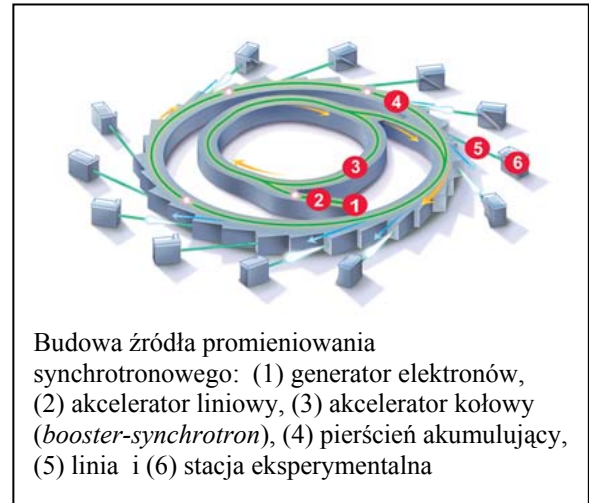
Promieniowanie synchrotronowe i jego właściwości:

- a) promieniowanie elektromagnetyczne emitowane przez poruszające się z relatywistycznymi prędkościami ładunki,
- b) zakres spektralny emitowanego promieniowania synchrotronowego,
- c) struktura czasowa promieniowania synchrotronowego

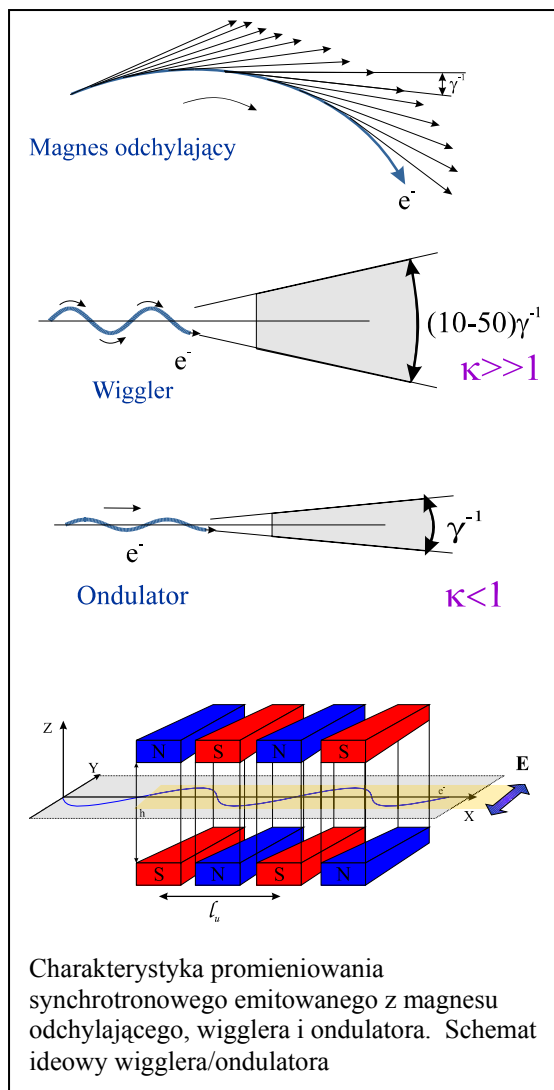
zakresie regulowana. Własność ta umożliwia prowadzenie badań dynamiki różnych układów z nanosekundową rozdzielczością czasową,

- **polaryzację.** Promieniowanie synchrotronowe w płaszczyźnie zakrzywionego toru jest w naturalny sposób spolaryzowane liniowo. Istnieją możliwości otrzymania promieniowania o innej polaryzacji, np. kołowej.

Załączony rysunek ilustruje zasadnicze elementy źródła promieniowania synchrotronowego (określanego często potocznie jako synchrotron). Elektrony wstrzykiwane są ze specjalnego generatora do akceleratora liniowego gdzie zostają wstępnie przyspieszone. Dalej wiązka elektronów zostaje przyspieszona do pełnej energii (w granicach od kilkuset megaelektronowoltów (MeV) do kilku gigaelektronowoltów (GeV) - w zależności od wymaganej końcowej energii promieniowania synchrotronowego) w akceleratorze kołowym (*booster synchrotron*) i wprowadzona do pierścienia akumulującego.



Wyemitowane w różnych odcinkach pierścienia akumulującego, w których następuje



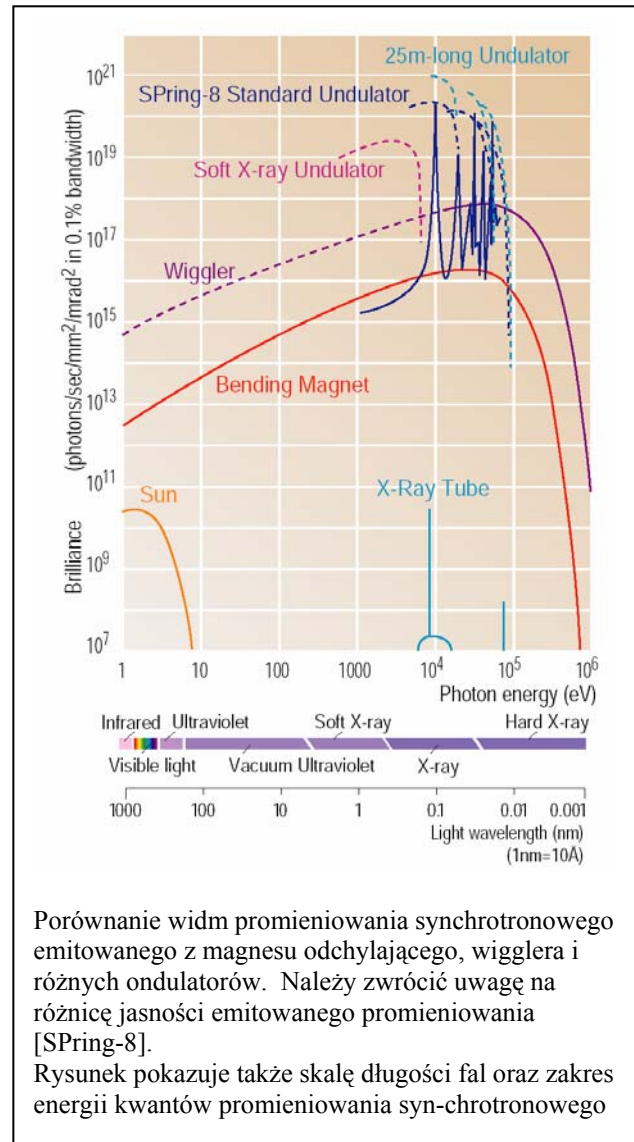
zakrzywienie toru elektronów, wiązki promieniowania synchrotronowego są wyprowadzane do różnego typu linii eksperymentalnych. W zależności od potrzeb linie eksperymentalne zawierają monochromatory, kolimatory lub inne odpowiednie dla danego zakresu długości fal elementy optyczne służące do uzyskania wiązki promieniowania o żądanych, potrzebnych w danej metodzie eksperymentalnej parametrach. Każda linia zakończona jest stacją eksperymentalną, gdzie rozmieszczona jest aparatura potrzebna do prowadzenia konkretnych badań.

Odpowiedni kształt orbity elektronowej w pierścieniu akumulacyjnym jest osiągany poprzez sekcje magnesów odchylających (tzw. *lattice*) oddzielonych odcinkami prostymi, na których elektrony poruszają się ruchem jednostajnym prostoliniowym. Jak już nadmieniono, magnesy odchylające są jednym ze źródeł promieniowania synchrotronowego. Proste odcinki pierścienia akumulującego mogą zostać wykorzystane do zamontowania wigglerów lub ondulatorów (tzw. *insertion devices*), urządzeń które m. in. w zasadniczy sposób zwiększają intensywność i stopień kolimacji emitowanego promieniowania. Urządzenia te stanowią periodyczny układ magnesów stałych lub nadprzewodzących o odpowiedniej geometrii. Ze względu na rozłożenie magnesów (opisane okresem l_u [cm]) i wartość

indukcji wytwarzanego pola magnetycznego (B_0 [T]), które to parametry w decydujący sposób determinują charakterystykę emitowanego promieniowania, różni się dwa typy urządzeń : wiggler i undulatory. Ilościowym wskaźnikiem odróżniającym te reżimy pracy jest wartość współczynnika κ proporcjonalnego do iloczynu indukcji pola magnetycznego B_0 i okresu układu magnesów l_u : $\kappa = 0.934 \cdot B_0 \cdot l_u$. Załączony rysunek przedstawia schematycznie tor elektronów wymuszony przez odpowiedni układ magnesów. Dla $\kappa \gg 1$ urządzenie działa jak wiggler, natomiast dla $\kappa \leq 1$ odpowiada undulatorowi. Rozwartość stożka emisji może być oszacowana jako równa odwrotności czynnika Lorentza $\gamma^{-1} = (1-\beta^2)^{1/2}$, gdzie $\beta = v/c$ oraz v – prędkość

elektronu i c – prędkość światła w próżni. Dla undulatora charakterystycznym jest, że rozwartość stożka emisji w każdym punkcie toru elektronu jest większa od wartości maksymalnego kąta odchylenia wiązki od toru prostoliniowego. Sytuacja taka ma miejsce w polach magnetycznych o małej indukcji, kiedy odchylenie wiązki od toru prostoliniowego nie jest zbyt duże. Zwykle liczba oscylacji w undulatorze jest duża, a promieniowanie wyemitowane z odpowiednich fragmentów toru elektronowego jest koherentne, dając dla określonych długości fal (energii) wiązkę promieniowania w dużym stopniu spójnego o bardzo dużym natężeniu (por. rysunek: undulator o długości 25 m). Jeśli przeciwnie, maksymalne odchylenie kierunku wiązki od toru prostoliniowego w trakcie każdej oscylacji jest bardzo duże (co jest związane z dużą wartością indukcji pola magnetycznego) urządzenie nazywane jest wigglerem, a widmo emitowanego promieniowania pokrywa wtedy szeroki zakres energii i wykazuje w porównaniu z widmem promieniowania emitowanego z magnesów odchylających dużo większe natężenie, zaś jego górny zakres jest przesunięty w stronę wysokich energii.

Obydwa typy urządzeń są obecnie montowane we wszystkich synchrotronach i w zasadzie cały układ magnesów odchylających w pierścieniu akumulującym projektuje się tak aby był on optymalnie dopasowany do układu montowanych *insertion devices*. Takie źródła promieniowania synchrotronowego nazywa się źródłami 3-ciej generacji. Konkretny efekt działania opisanych urządzeń zainstalowanych w pierścieniu akumulującym japońskiego źródła promieniowania synchrotronowego SPring-8 pokazane są na załączonym rysunku. Rysunek pokazuje także skalę długości fal i zakres energii promieniowania synchrotronowego oraz wprowadza odpowiednie słownictwo.



2.2 Techniki pomiarowe wykorzystujące promieniowanie synchrotronowe i ich zastosowania

Unikalne własności promieniowania synchrotronowego powodują, że promieniowanie to znajduje zastosowanie w wielu, bardzo często odległych dziedzinach badań fundamentalnych i stosowanych. Fundamentalne badania przy użyciu promieniowania synchrotronowego prowadzone są między innymi w takich dziedzinach jak: **medycyna, biologia, fizyka, inżynieria materiałowa, nanotechnologia, geologia czy nauka o środowisku**. Istnieje także cały program produkcji mikroukładów mechanicznych metodą litografii.

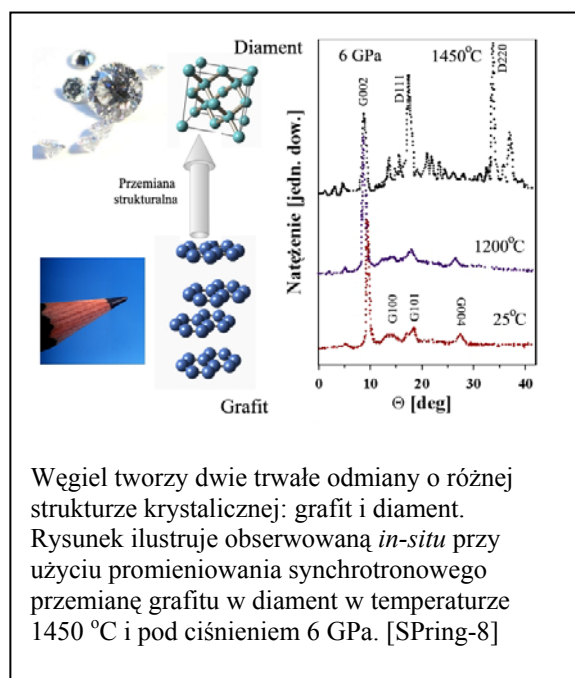
Zastosowania promieniowania synchrotronowego są nieodłącznie związane z dużą liczbą technik pomiarowych wykorzystujących to promieniowanie. Badania prowadzone różnymi technikami mogą być realizowane równocześnie ze względu na możliwość wyprowadzenia z jednego pierścienia akumulującego bardzo wielu linii pomiarowych oraz zainstalowanie wielu stacji eksperymentalnych. Należy wyraźnie zaznaczyć, że unikalne własności promieniowania synchrotronowego, a w szczególności olbrzymie natężenie, szeroki zakres spektralny oraz znakomita kolimacja umożliwiają często wykonanie takich badań lub analiz, które praktycznie nie są możliwe do wykonania przy użyciu konwencjonalnych źródeł promieniowania elektromagnetycznego.

Metody eksperymentalne w których wykorzystywane jest promieniowanie synchrotronowe można sklasyfikować w kilku kategoriach:

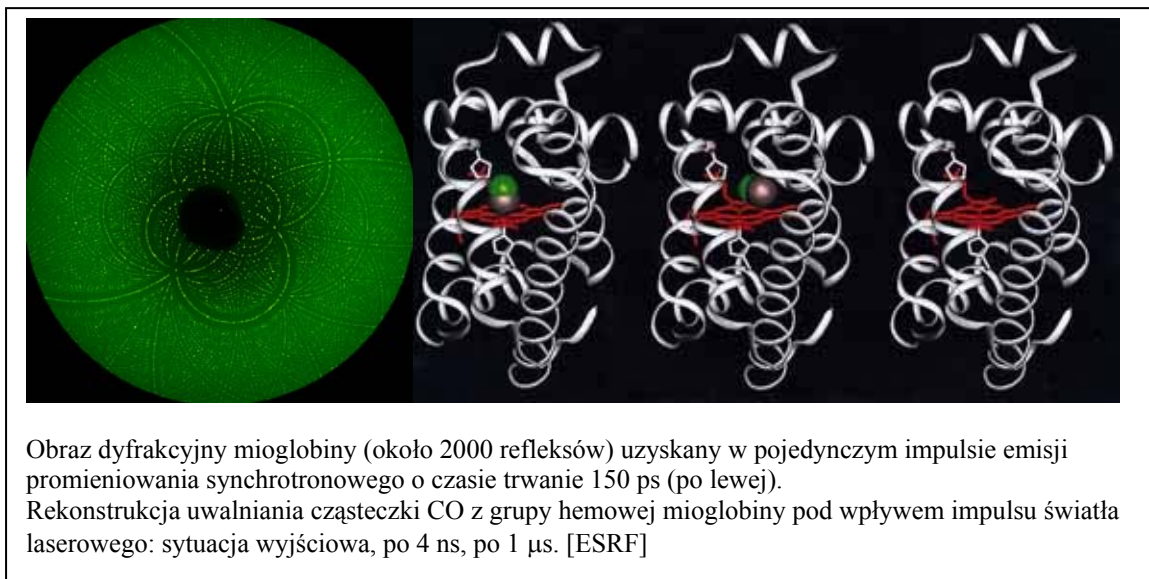
- metody dyfrakcyjne albo ogólniej metody związane z rozpraszaniem promieniowania synchrotronowego,
- metody spektroskopowe,
- mikroskopia albo obrazowanie, prowadzone w szerokim zakresie długości fal od dalekiej podczerwieni do wysokoenergetycznego promieniowania rentgenowskiego.

A. Metody dyfrakcyjne i rozpraszanie promieniowania synchrotronowego

Z reguły, prawie każde źródło promieniowania synchrotronowego posiada zainstalowane linie eksperymentalne przewidziane do prowadzenia badań **dyfrakcyjnych XRD (X-ray Diffraction)**. Promieniowanie synchrotronowe, za względu na bardzo dużą intensywność oraz możliwość wybrania przy użyciu odpowiednich monochromatorów fotonów o ściśle określonej i optymalnej dla danego zagadnienia długości fali, doprowadziło do istotnego rozwoju **dyfrakcji proszkowej**. W oparciu o odpowiednie oprogramowanie (np. metoda Rietvelde), metoda ta pozwoliła na badanie i identyfikowanie bardzo złożonych struktur krystalicznych często w ekstremalnych warunkach, np. pod bardzo wysokimi ciśnieniami. Dobrym przykładem może być tutaj przedstawione na rysunku śledzenie transformacji grafitu w inną alotropową odmianę węgla diament w temperaturze 1450 °C oraz pod ciśnieniem 6 GPa.



Duża kątowna zdolność rozdzielcza pozwala m.in. na otrzymanie informacji strukturalnych dla białek i innych układów biologicznych, które nie mogą być otrzymane w postaci monokryształów. Ponieważ w projektowaniu i syntezie nowych leków niezbędnym jest prowadzenie systematycznej analizy strukturalnej, możliwość ta jest bardzo atrakcyjna dla przemysłu farmaceutycznego. Stały rozwój techniki detekcyjnej, objawiający się m.in. konstruowaniem coraz lepszych detektorów pozycyjnych, umożliwia przy dużym natężeniu promieniowania szybką rejestrację bardzo dobrej jakości dyfraktogramów. Pozwala to często śledzić przebieg reakcji chemicznych „in-situ”, bardzo użyteczna możliwość wykorzystywana przy próbach syntezy nowych materiałów oraz w badaniach związanych z poszukiwaniem optymalnych katalizatorów.



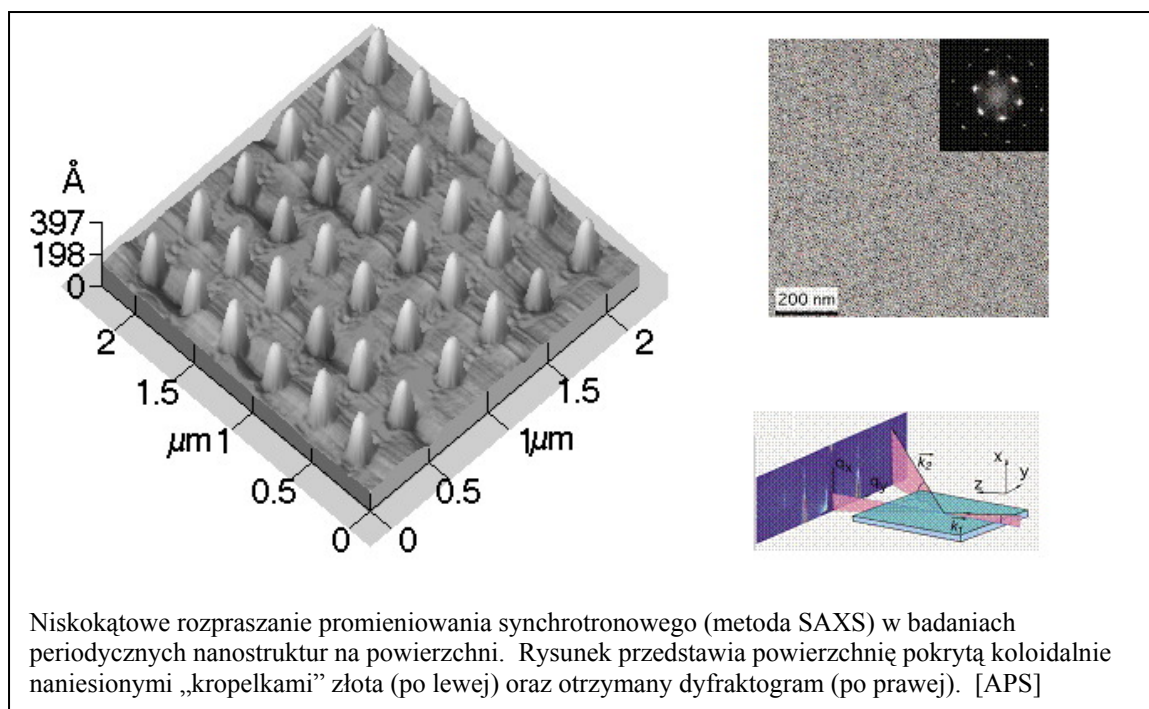
Dzięki zastosowaniu promieniowania synchrotronowego, dokonała się i stale jeszcze się dokonuje prawdziwa rewolucja w biologii strukturalnej. Prowadzone są systematyczne badania struktury białek oraz innych materiałów biologicznych, a praktycznie każde źródło promieniowania synchrotronowego wyposażone jest w linię pomiarową do **krystalografii białek** (*protein crystallography*). Możliwość zastosowania promieniowania o różnych długościach fali pozwala na rozwiązanie problemu fazy metodą MAD (*Multiwavelength Anomalous Diffraction*). Przy użyciu promieniowania synchrotronowego określono już struktury krystaliczne wielu materiałów biologicznych, a ciągle rosnące potrzeby w tej dziedzinie prowadzą do konstrukcji na wielu synchrotronach nowych linii dyfrakcyjnych.

Cytowane już własności promieniowania synchrotronowego pozwalają na śledzenie dynamiki różnych procesów zachodzących w materiałach biologicznych, m.in. na badania struktury białek w różnych stanach konformacyjnych. Przykładem może być tutaj także przedstawione na rysunku śledzenie procesu uwalniania cząsteczki CO z grupy hemowej mioglobiny pod wpływem impulsu światła laserowego. Proces ten obserwowany jest jako sekwencja dyfraktogramów, z których każdy otrzymano w czasie około 150 pikosekund.

Ważną metodą badania obiektów o rozmiarach nanometrowych, np. samoorganizujących się struktur na powierzchni czy układów wielowarstwowych, jest **niskokątowe rozpraszanie promieniowania rentgenowskiego SAXS** (*Small Angle X-ray Scattering*). W badaniach powierzchni metoda ta dostarcza informacji komplementarnych do informacji uzyskiwanych przy użyciu mikroskopii skaningowej. Pozwala na śledzenie zachodzących na powierzchni przejść fazowych i reakcji katalitycznych. Jest nieoceniona w badaniach heterostruktur i układów wielowarstwowych dla warstw o grubości rzędu nanometrów, dając m.in. trudne do

uzyskania innymi metodami informacje o jakości międzypowierzchni. Badaniami tą metodą jest bardzo zainteresowany przemysł półprzewodnikowy.

Jako ilustrację skuteczności tej metody zamieszczono przykład dyfraktogramu uzyskanego dla powierzchni pokrytej naniesionymi koloidalnie „kropelkami” złota.

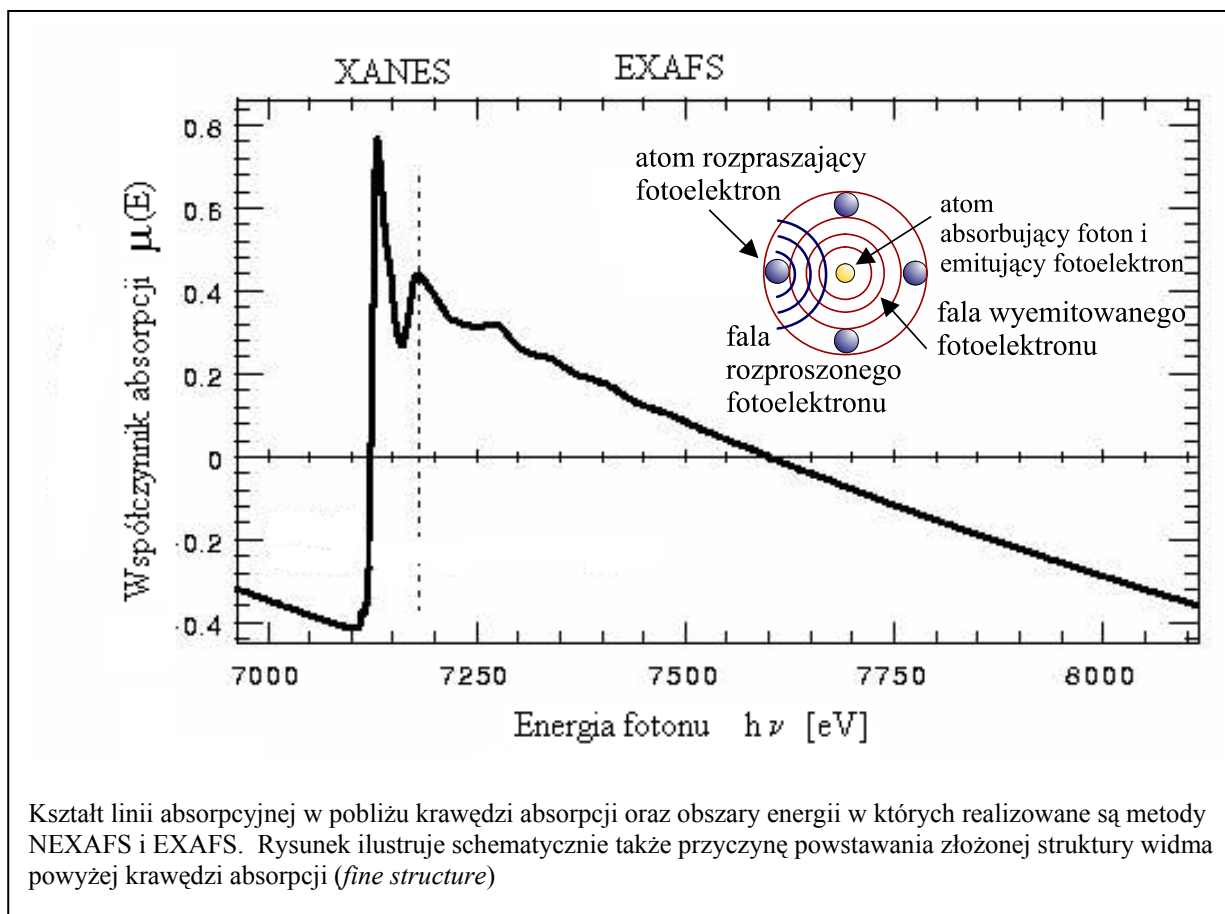


B. Metody spektroskopowe.

Przedstawione powyżej unikalne własności promieniowania synchrotronowego pozwalają na uprawianie wielu metod **spektroskopowych** wykazujących szeroki wachlarz zastosowań. Pokróćce omówione zostaną niektóre z nich, przy czym należy na samym początku zaznaczyć, że ze względu na obszerność zagadnienia, poniższy przegląd nie pretenduje do kompletności. Na wstępie warto zwrócić uwagę na fakt, że wiele z przedstawionych tutaj metod może być realizowana zarówno w zakresie wysokoenergetycznym, tzn. dla twardego promieniowania rentgenowskiego jak i w obszarach średnich i niskich energii fotonów.

1. Rentgenowska spektroskopia absorpcyjna XAS (X-ray Absorption Spectroscopy).

Jedną z ważnych metod badawczych realizowanych przy użyciu promieniowania synchrotronowego jest **spektroskopia absorpcyjna XAS (X-ray Absorption Spectroscopy)**. Pomiar polega na wyznaczeniu współczynnika absorpcji w zależności od energii promieniowania $\mu(E)$ w pobliżu krawędzi absorpcji charakterystycznej dla każdego pierwiastka. Metoda ta pozwala na uzyskanie informacji o walencyjności absorbujących atomów **metodą NEXAFS (Near Edge X-ray Absorption Fine Structure)** lub na określenie liczby koordynacyjnej oraz typu i odległości sąsiednich atomów dla wybranego atomu centralnego **metodą EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure)**. Kształt linii absorpcyjnej w pobliżu krawędzi absorpcji oraz obszary energii w których realizowane są metody NEXAFS i EXAFS przedstawiono na załączonym rysunku, który ilustruje również przyczynę powstawania złożonej struktury widma powyżej krawędzi absorpcji (*fine structure*).



Ponieważ metoda XAS wymaga możliwości ciągłej zmiany energii promieniowania o bardzo dużym natężeniu, praktyczni może być realizowana tylko przy użyciu promieniowania synchrotronowego. Pomiary mogą być prowadzone w geometrii absorpcyjnej lub fluorescencyjnej. Badania takie, w zależności od położenia krawędzi absorpcyjnej danego pierwiastka mogą być prowadzone w obszarze wysokich energii (głównie dla krawędzi K) jak i w obszarze miękkiego promieniowania rentgenowskiego (dla krawędzi K lekkich pierwiastków lub krawędzi L i M cięższych pierwiastków). Ze względu na możliwość określenia lokalnej koordynacji wybranego atomu, metoda EXAFS posiada bardzo ważne zastosowania w badaniach materiałów niekryształicznych takich jak: szkła, ceramiki, materiały amorficzne i materiały w fazie ciekłej oraz w badaniach nanomateriałów, cienkich warstw i katalizatorów.

2. Fluorescencja promieniowania rentgenowskiego XRF (X-ray Fluorescence).

Ważną metodą badawczą, wymagającą tych samych właściwości źródła promieniowania co metoda XAS jest **fluorescencja rentgenowska XRF (X-ray Fluorescence)**, w której pobudzone intensywną wiązką promieniowania synchrotronowego atomy reemitują charakterystyczne promieniowanie rentgenowskie o energii zależnej od liczby atomowej danego pierwiastka. Emitowane promieniowanie jest analizowane detektorem o wysokiej zdolności rozdzielczej, a odpowiednia analiza widma pozwala uzyskać ilościowe informacje o składzie chemicznym badanych materiałów. Duże natężenie wiązki promieniowania synchrotronowego pozwala wykrywać zawartość pierwiastków śladowych o koncentracji do $\cong 10^8$ atomów/cm². Możliwość zogniskowania wiązki promieniowania synchrotronowego na obszarze rzędu kilku mikrometrów w metodzie **μ XRF (microXRF)** umożliwia skanowanie składu powierzchni z mikrometrową dokładnością. Jako typowe zastosowania tej metody można wymienić testowanie

zanieczyszczeń na powierzchni półprzewodników lub badania rozkładu pierwiastków w pojedynczej komórce.

3. *Spektroskopia fotoemisyjna XES (X-ray Electron Spectroscopy).*

Promieniowanie synchrotronowe umożliwia prowadzenie badań struktury elektronowej różnych materiałów poprzez detekcję widma fotoelektronów emitowanych pod wpływem naświetlania promieniowaniem rentgenowskim. W zależności od energii użytego promieniowania, rozróżniamy tutaj **metodę XPS (X-ray Photoemission Spectroscopy)**, którą prowadzone są badania widm elektronów wyemitowanych z głęboko leżących poziomów rdzeni atomowych oraz **metodę UPS (Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy)** wykorzystującą promieniowanie o energii do kilkudziesięciu elektronowoltów i dającą wiele cennych informacji o strukturze elektronowej pasma walencyjnego. Na większości synchrotronów realizowana jest także **metoda ARUPS (Angular Resolved UPS)**, w której dodatkowo, jakby w uzupełnieniu do metody UPS analizowany jest także pęd wyemitowanych w procesie fotoemisji elektronów. Metoda ta daje fundamentalne informacje o elektronowych relacjach dyspersji i kształcie powierzchni Fermiego. Jako jej rozszerzenie można potraktować **metodę SPARUPS (Spin Polarized ARUPS)**, wykorzystującą polaryzację promieniowania synchrotronowego z analizą polaryzacji spinowej fotoelektronów. Należy nadmienić, że metoda XPS jest także powszechnie używana do analizy składu chemicznego materiałów a sama metoda nazywa się wtedy **ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis)**. Możliwość użycia promieniowania o niskiej energii pozwala określać skład chemiczny powierzchni lub międzypowierzchni m.in. dla układów półprzewodnikowych.

4. *Spektroskopia w podczerwieni IR (Infrared Spectroscopy).*

Synchrotron jest także źródłem promieniowania elektromagnetycznego w podczerwonej części widma, o jasności przewyższającej o około 100 razy jasność najlepszych źródeł konwencjonalnych. Pozwala to na prowadzenie badań widm rotacyjnych i oscylacyjnych w dalekiej podczerwieni dla wielu interesujących molekuł z bardzo dobrą przestrzenną zdolnością rozdzielczą. Przy użyciu odpowiednio skonstruowanego mikroskopu, wiązka fotonów w pośrednim obszarze podczerwieni może być zogniskowana na obszarze o wymiarach liniowych $\cong 5 \mu\text{m}$, co pozwala na badanie widm absorpcyjnych w tym obszarze energii dla pojedynczych komórek. Ponieważ widmo absorpcyjne jest bezpośrednio związane z biochemią komórki, jest nadzieja, że takie badania przyczynią się do wyjaśnienia molekularnego podłoża wielu chorób, np. chorób nowotworowych czy choroby Alzheimera.

C. Mikroskopia i obrazowanie przy użyciu promieniowania rentgenowskiego.

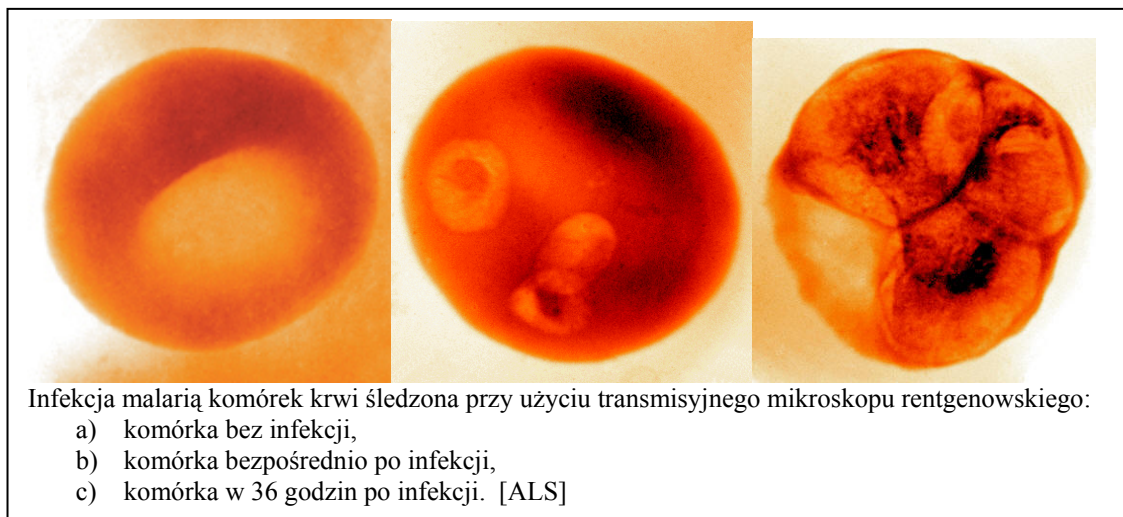
Szeroki zakres spektralny oraz duże natężenie wiązki promieniowania synchrotronowego dają możliwości obrazowania różnych obiektów przy użyciu fotonów o różnych długości fali od promieniowania dalekiej podczerwieni do twardego promieniowania rentgenowskiego.

Ze względu na szeroką skalę zastosowań, bardzo popularną metodą badawczą jest **transmisyjna mikroskopia rentgenowska TXM (Transmission X-ray Microscopy)** realizowana w zakresie miękkiego promieniowania rentgenowskiego. Metoda ta wykazuje szereg zalet takich jak:

- możliwość uzyskania bardzo dobrego kontrastu poprzez wykorzystanie zależności współczynnika absorpcji dla różnych pierwiastków od długości fali,
- wysoka przestrzenna zdolność rozdzielcza (obecnie do 15 nm), jeśli jako elementy optyczne zostaną użyte soczewki Fresnela,

- stosunkowo duży obszar przestrzenny który może być jednocześnie obrazowany (15-20 μm),
- nanosekundowa czasowa zdolność rozdzielcza związana z czasową strukturą wiązki promieniowania synchrotronowego.

Mikroskopia miękkiego promieniowania rentgenowskiego znalazła szerokie zastosowania w badaniach materiałów magnetycznych, inżynierii materiałowej, ochronie środowiska oraz w biologii a mikroskopy transmisyjne są bardzo często konstruowane w wersji **scanningowej STXM (Scanning TXM)**.



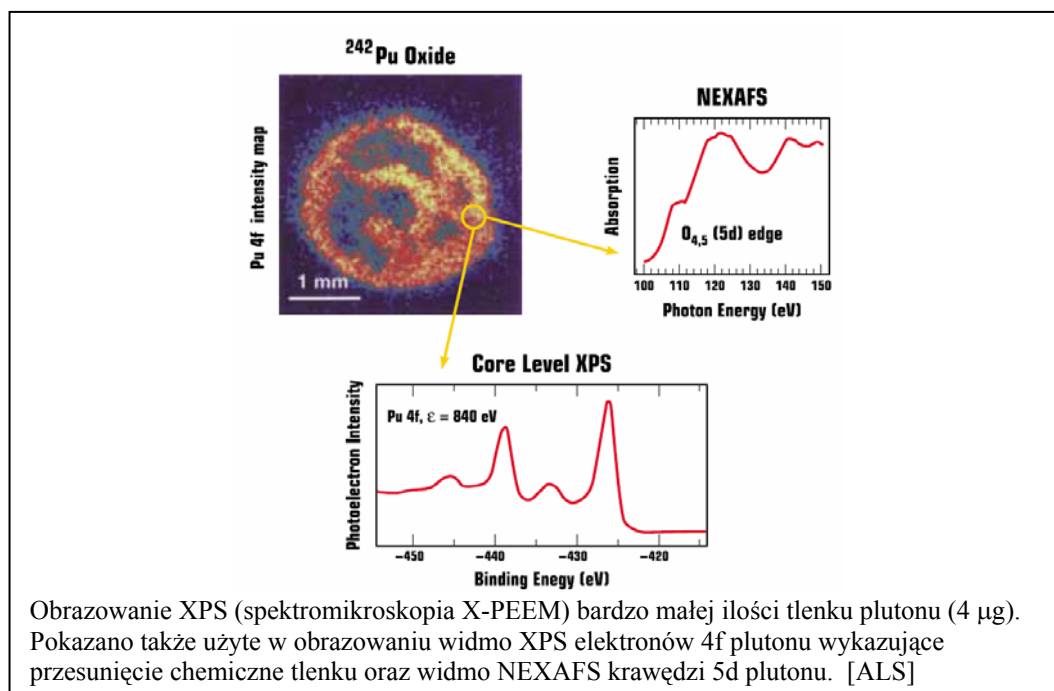
W zastosowaniach biologicznych, mikroskopia rentgenowska jest przede wszystkim stosowana w badaniach komórki. Większość badań biologicznych stosuje promieniowanie o energii w zakresie tzw. okna wodnego (water window), tzn. fotony o energii pomiędzy krawędziami absorpcji węgla ($E_{\text{ae}} = 284 \text{ eV}$, $\lambda = 4.4 \text{ nm}$) oraz tlenu ($E_{\text{ae}} = 543 \text{ eV}$, $\lambda = 2.3 \text{ nm}$). Dla promieniowania rentgenowskiego o energii około 500 eV, absorpcja zawierających głównie węgiel materiałów organicznych jest o około rząd wielkości mniejsza od absorpcji wody, zapewniając naturalny kontrast. Energie ta jest także dobrze dopasowana do możliwości obrazowania komórek o grubościach rzędu kilku mikrometrów. Warto być może podkreślić, że w tym bardzo interesującym ze względów aplikacyjnych obszarze energii nie ma żadnych dobrej jakości klasycznych źródeł promieniowania rentgenowskiego. Jako przykład skuteczności działania metody TXM można przytoczyć obserwację infekcji malarią komórek krwi. Obrazy pokazane na załączonym rysunku zostały otrzymane przy użyciu mikroskopu transmisyjnego zainstalowanego przy źródle ALS (Berkeley, USA).

Bardzo ważne ze względów aplikacyjnych są także metody topografii i holografii rentgenowskiej. Pierwsza z nich daje ważne informacje o defektach w ciele stałym, zaś druga służy do trójwymiarowego (3D) obrazowania otoczenia fluoryzującego atomu w sieci krystalicznej.

Duże nadzieje mikroskopii rentgenowskiej są związane z możliwością wykorzystania w obrazowaniu kontrastu fazowego (phase-contrast imaging), np. w metodzie **CXDI (Coherent X-ray Diffraction Imaging)**. Oddziaływanie promieniowania elektromagnetycznego z materią prowadzi do zmiany zarówno amplitudy jak i fazy rozpraszanych fal. Tradycyjnie, w obrazowaniu jest głównie używany kontrast spowodowany zmianą amplitudy, która jest związana z zależnością współczynnika absorpcji od gęstości materiału. Jednakże, duży stopień koherencji promieniowania synchrotronowego, zwłaszcza emitowanego z undulatorów, pozwala na uzyskanie kontrastu spowodowanego zmianą fazy. Kontrast fazowy może być dla lekkich

materiałów większy o około dwa rzędy wielkości od kontrastu spowodowanego różnicą współczynników absorpcji. Metoda ta, znajdująca przede wszystkim zastosowanie w badaniach biologicznych i medycznych, pozwala na znacznie lepszą wizualizację małych szczegółów miękkich tkanek.

Przytoczone już unikalne własności promieniowania synchrotronowego, a zwłaszcza osiągnięta w nowoczesnych synchrotronach olbrzymia jasność promieniowania, pozwala na stosowanie opisanych wcześniej metod spektroskopowych (dających np. możliwość uzyskania informacji o składzie chemicznym lub informacji strukturalnych) z mikroskopową przestrzenną zdolnością rozdzielczą (patrz rysunek).

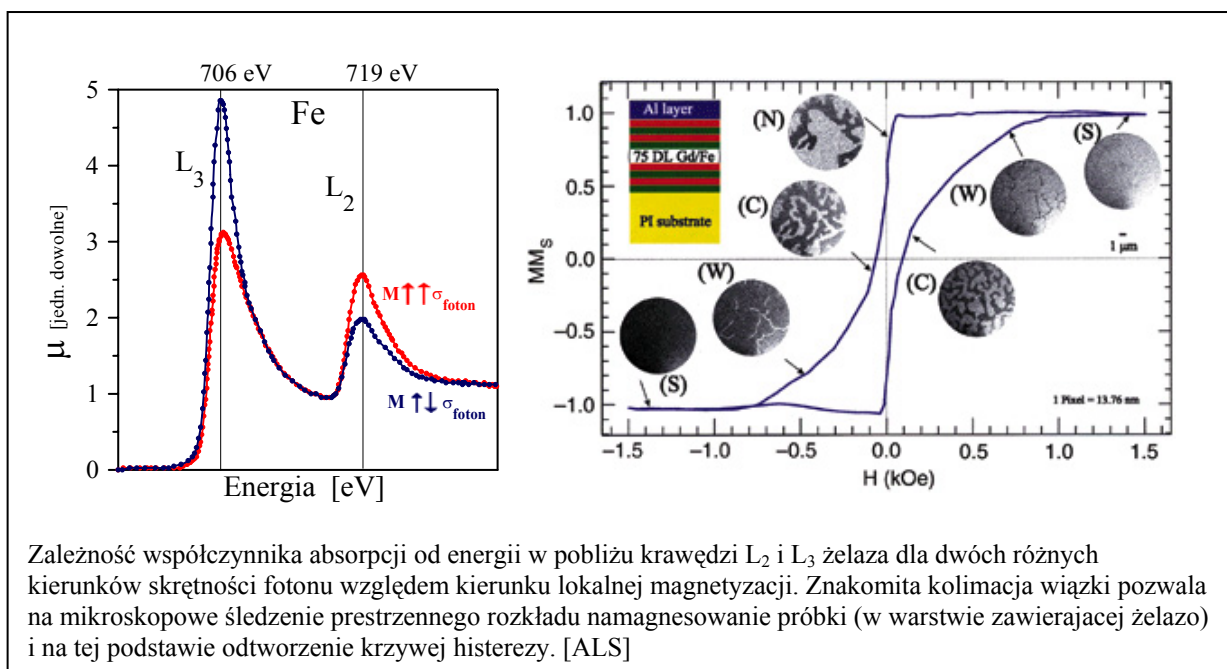


Połączenie takiej mikro-spektroskopii z obrazowaniem, zwane **spektromikroskopia**, umożliwia na przykład badanie składu chemicznego materiałów w lokalnej skali o wymiarach rzędu ułamka mikrometra, w odróżnieniu od otrzymywanych klasycznie informacji o składzie chemicznym materiałów wyśrednionym po dużym obszarze przestrzennym. We współczesnej technologii istnieje pilna potrzeba prowadzenia takich badań, a jako narzucające się przykłady zastosowań można przytoczyć testowanie stanu obwodów scalonych w mikroelektronice lub obrazowanie domen magnetycznych w układach służących do magnetycznego zapisu informacji. Ważnym jest także możliwość śledzenia w skali mikroskopowej efektów spowodowanych atomami domieszkowymi, wprowadzonymi dla poprawienia własności materiałów magnetycznych lub nadprzewodzących.

Bardzo efektywnym okazało się połączenie metod spektroskopowych stosowanych do określenia składu chemicznego poprzez absorpcję promieniowania rentgenowskiego, np. NEXAFS oraz spektroskopię elektronową XPS z metodą skaningowej mikroskopii elektronowej w obszarze miękkiego promieniowania rentgenowskiego (metody: **STXM, Scanning Transmission X-ray Microscopy** oraz **X-PEEM, X-ray Photoelectron Emission Microscopy**). Obydwie metody wykazują spektralną zdolność rozdzielczą rzędu 0.1 eV (w dobrej jakości urządzeniach nawet do 0.05 eV) oraz dają możliwość otrzymania informacji o składzie chemicznym z przestrzenną zdolnością rozdzielczą około 100 nm (w szczególnych przypadkach nawet do około 10 nm).

Jako przykład zastosowania omówionych metod mikrospektroskopii, załączony rysunek ilustruje identyfikację małej ilości (masa 4 μg) tlenku plutonu. Na rysunku pokazano także widmo XPS elektronów 4f oraz krawędź absorpcji 5d plutonu.

Osobną grupę metod badawczych stosujących promieniowanie synchrotronowe stanowią eksperymenty wymagające promieniowania elektromagnetycznego o określonej polaryzacji. Ta cecha promieniowania synchrotronowego jest szczególnie użyteczna w badaniach własności magnetycznych materiałów. Rozpraszanie liniowo spolaryzowanego promieniowania na spolaryzowanych elektronach dostarcza wielu pożytecznych informacji o własnościach magnetycznych materiałów, m.in. jest wykorzystywane do określania struktur magnetycznych. Jest także z powodzeniem stosowane do badania magnetyzmu powierzchni. Wiele użytecznych informacji dostarczają badania **metodą XMCD (X-ray Magnetic Circular Dichroism)**. Metoda ta polega na pomiarze współczynnika absorpcji promieniowania spolaryzowanego kołowo w pobliżu krawędzi absorpcji materiałów magnetycznie spolaryzowanych. W obszarze krawędzi absorpcji, współczynnik absorpcji silnie zależy od wzajemnej orientacji wektora skrętności fotonu oraz kierunku wektora magnetyzacji. Dużą zaletą tej metody, tak jak opisywanej już metody XAS (X-ray Absorption Spectroscopy), jest czułość na badania magnetyzmu określonych pierwiastków. Jest to skutkiem silnej zależności położenia krawędzi absorpcji od liczby atomowej danego pierwiastka. Oczywiście badania takie są możliwe dzięki szerokiemu zakresowi spektralnemu promieniowania synchrotronowego i możliwość uzyskania promieniowania monochromatycznego o dowolnej energii przy użyciu odpowiedniego monochromatora.

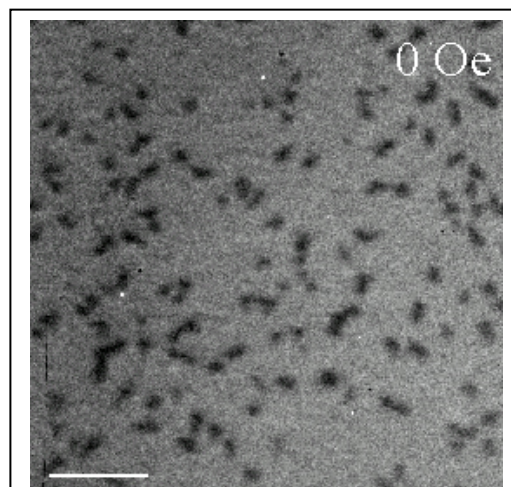


Bardzo pożyteczną metodą wykorzystującą także promieniowanie spolaryzowane kołowo i mającą szerokie zastosowanie w zaawansowanych badaniach magnetycznych, jest magnetyczna mikroskopia transmisyjna w obszarze miękkiego promieniowania rentgenowskiego **MTXM (Magnetic Transmission X-ray Microscopy)**. Metoda ta jest praktycznie niezastąpiona w badaniach nanomagnetyków oraz wykorzystywanych do zapisu i odczytu informacji układów cienkowarstwowych wykazujących dodatkowo jakąś strukturę w płaszczyźnie warstwy. Mikroskopia MTXM wykazuje następujące zalety (niektóre z nich są ogólnie cechą

charakterystyczną mikroskopii transmisyjnej realizowanej przy użyciu miękkiego promieniowania rentgenowskiego):

- bardzo dobra przestrzenna zdolność rozdzielcza, przy zastosowaniu soczewek Fresnela jako elementów optycznych,
- czułość na obrazowanie rozkładu lokalnej magnetyzacji dla określonych pierwiastków (kontrast jest uzyskiwany przy zastosowaniu metody XMCD),
- duży obszar przestrzenny który może być jednocześnie obrazowany (rzędu mikrometrów),
- nanosekundowa czasowa zdolność rozdzielcza, wynikająca ze struktury czasowej emitowanego promieniowania rentgenowskiego.

Ostatnia własność jest bardzo przydatna w badaniach dynamiki magnesowania różnych układów. Dla zilustrowania przydatności mikroskopii MTXM pokazano otrzymany tą metodą rozkład domen magnetycznych w złożonej z nanometrowych ziaren warstwie $(\text{Co}_{83}\text{Cr}_{17})_{87}\text{Pt}_{13}$ o grubości około 50 nm. (ALS)



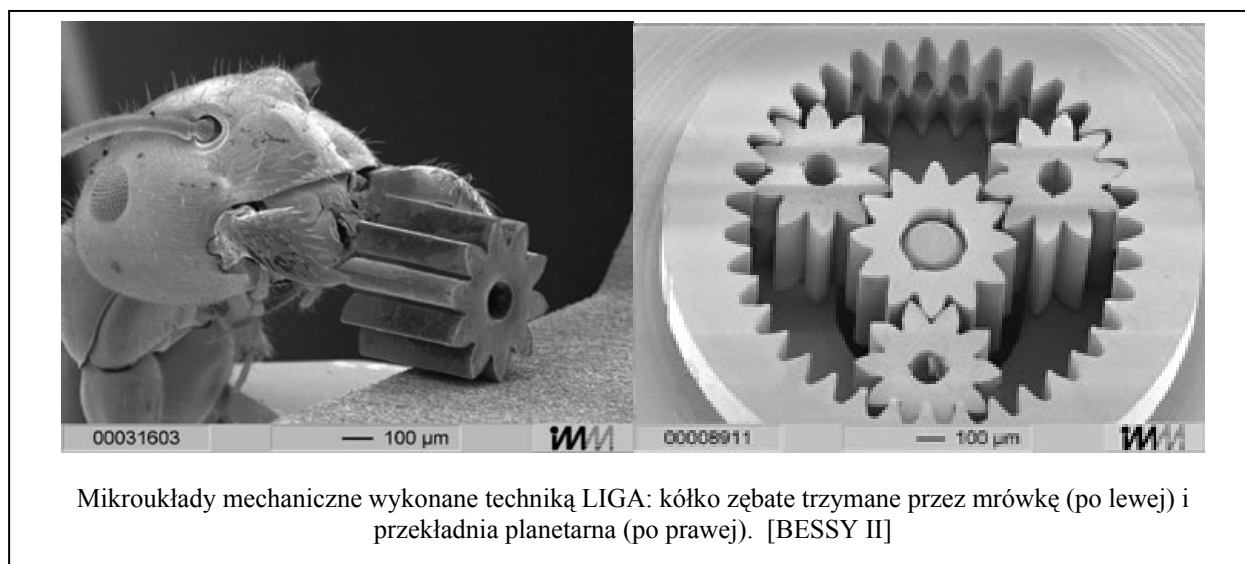
Rozkład domen magnetycznych w złożonej z ziaren o nanometrowych rozmiarach warstwie $(\text{Co}_{83}\text{Cr}_{17})_{87}\text{Pt}_{13}$ o grubości 50 nm. Obrazowanie wykonano dla krawędzi absorpcji L_3 kobaltu. [ALS]

Osobnego potraktowania wymaga omówienie zastosowań promieniowania synchrotronowego w **medycynie**. Przede wszystkim, unikalne własności promieniowania synchrotronowego pozwalają na uzyskanie bardzo dobrej jakości obrazowania serca, płuc oraz naczyń krwionośnych (angiografia). Dobra jakość jest m.in. wynikiem stosowania zaawansowanych technik obliczeniowych. Istnieją jednak także inne przyczyny, takie jak: dyfrakcyjne wspomaganie obrazowania (wykorzystanie kontrastu fazowego) oraz wzmocnienie kontrastu absorpcyjnego poprzez selektywny dobór odpowiedniej długości fali promieniowania. Bardzo ważnym zastosowaniem promieniowania synchrotronowego jest radioterapia przy pomocy bardzo intensywnej wiązki promieniowania o bardzo małym przekroju poprzecznym, tzw. mikrowiązki. Należy dodać, że rozwój techniki synchrotronowej, prowadzący do uzyskiwania coraz to bardziej intensywnych wiązek promieniowania, będzie ciągle wykorzystywany do poprawienia jakości i zdolności rozdzielczej obrazowania. Przykładem może być tutaj program jaki w tej dziedzinie został opracowany dla kanadyjskiego źródła CLS (Canadian Light Source), którego realizacja ma doprowadzić do uzyskania możliwości obrazowania małych struktur w miękkich tkankach, sercu i płucach.

Jednym z ważnych zadań realizowanych przy użyciu promieniowania synchrotronowego, zwłaszcza wysokoenergetycznej części jego widma, jest **produkcja mikroukładów mechanicznych**, tzn. obiektów o wymiarach rzędu mikrometrów metodą litografii. Obiekty o tak małych rozmiarach znajdują coraz większe zastosowanie w chemii, biomedycynie oraz w technice. Warto w tym miejscu przytoczyć kilka przykładów z szerokiej gamy już realizowanych oraz projektowanych zastosowań mikroukładów. Tradycyjnie już metoda litografii używana jest w przemyśle elektronicznym do wytwarzania miniaturowych obwodów scalonych. W związku z rozwojem telekomunikacji, otwiera się duży rynek dla produktów mikro-optycznych. Dużym użytkownikiem mikroukładów jest przemysł samochodowy, gdzie działają one m.in. jako czujniki ciśnienia oraz w formie mikrowtryskiwaczy i mikrodysz, przyczyniając się do zwiększenia efektywności układu wtryskowego. W chemii zastosowanie znalazły m.in. następujące mikroukłady: mikropompy, mikrosita, mikrozwory itp. Mikroreaktory chemiczne z ciągłym przepływem, charakteryzujące się małymi rozmiarami i

dużym stosunkiem powierzchni do objętości, przyczyniają się do poprawienia czystości produktów reakcji chemicznych. Jedną z dziedzin w której przewiduje się szerokie zastosowanie mikroukładów jest medycyna, gdzie poza możliwościami zastosowań w diagnostyce jako biosensory, występuje pilna potrzeba zastosowania implantowalnych mikrouządzeń dla przeprowadzanie operacji chirurgicznych.

W chwili obecnej sądzi się, że najlepszą technologią do wytwarzania skomplikowanych struktur o rozmiarach rzędu mikrometrów, jest opracowany na początku lat osiemdziesiątych ubiegłego wieku w Karlsruhe proces LIGA (Lithografie, Galvanoformung und Abformung). Ponieważ metoda ta zapewnia możliwość wytwarzania trójwymiarowych mikroukładów przy stosunkowo niskich kosztach, praktycznie każde źródło promieniowania synchrotronowego dysponuje przynajmniej jedną linią prowadzącą tego typu produkcję. Litografia wykonana przy użyciu promieniowania synchrotronowego umożliwia wykonanie struktur o średnicach rzędu mikrometrów i o wysokości od około mikrometra do 2 mm. Załączony rysunek przedstawia kilka skomplikowanych układów wykonanych techniką LIGA na synchrotronie BESSY II w Berlinie.



Mikroukłady mechaniczne wykonane techniką LIGA: kółko zębate trzymane przez mrówkę (po lewej) i przekładnia planetarna (po prawej). [BESSY II]

Przedstawiony powyżej przegląd metod badawczych oraz zastosowań promieniowania synchrotronowego jest daleki od kompletności. Miał on raczej na celu zwrócenie uwagi na pewną liczbę zagadnień z dziedziny nauk ścisłych i stosowanych, gdzie zastosowanie promieniowania synchrotronowego było związane z osiągnięciem istotnego postępu w rozwiązywaniu konkretnych zadań stawianych nauce czy też współczesnej technologii. Powyższy przegląd został uporządkowany według klucza prezentującego różne metody badawcze wykorzystujące promieniowanie synchrotronowe i czasem w niewielkim stopniu pokazywał możliwości ich zastosowań. Dlatego, na zakończenie tego fragmentu opracowania, postaramy się zaprezentować możliwości zastosowań promieniowania synchrotronowego w różnych dziedzinach nauki i techniki w formie tabelki. Oczywiście liczba możliwych aplikacji zależy od liczby linii pomiarowych wyprowadzonych z pierścienia akumulacyjnego oraz ich wyposażenia determinującego zakres energii wyprowadzonego promieniowania. W tym przypadku, jako przykładowe wybrano 7 linii proponowanych do zainstalowania w fazie początkowej przy synchrotronie, który mógłby zostać zbudowany w Polsce i zlokalizowany w pracującym na rzecz wszystkich zainteresowanych naukowców Centrum Promieniowania Synchrotronowego. Sposób prezentacji wzorowano na broszurze informacyjnej promującej możliwości nowopowstałego australijskiego źródła promieniowania synchrotronowego *Boomerang*.

Oznaczenie linii w projekcie polskiego synchrotronu:	U4	U1	M1	U3	M3	M4	W2
	Krytalografia bialek	Rentgenowskie badania dyfrakcyjne	Wykorozdzielcza rentgenowska spektroskopia absorpcyjna i emisyjna w zakresie wysokich energii	Spektroskopia miękkiego promieniowania X	Linia niskich energii (NIR-Vis-UV-SX)	Spektroskopia bliskiej i dalekiej podczzerwieni, mikroskopia	Mikroskopia twardego promieniowania X, mikrotomografia
Nauki biologiczne i medyczne							
Badania biologiczne i projektowanie leków	•	•	•		•	•	•
Biotechnologia i biosensory	•		•	•	•	•	
Biomedycyna i obrazowanie medyczne						•	•
Terapia medyczna							•
Rośliny i zboża	•	•	•				•
Nauki przyrodnicze i techniczne							
Ochrona środowiska		•	•			•	
Zaawansowane materiały							
- polimery				•		•	•
- ceramiki		•	•	•		•	•
- nanomateriały i kompozyty		•		•	•	•	•
- metale i stopy		•		•	•		•
- mikroelektronika i materiały magnetyczne		•	•	•	•	•	•
- biomateriały		•		•	•	•	•
Mineralogia		•	•	•	•		•
Nauki o ziemi, geologia		•	•	•	•	•	
Reakcje chemiczne i kataliza		•	•	•	•	•	
Technologia rolnicza	•	•	•	•			•
Technologia żywności	•	•				•	
Zaawansowana technologia							
Produkcja i testowanie mikroukładów mechanicznych (LIGA)			•	•			•

2.3 Zastosowania promieniowania synchrotronowego - podsumowanie

Szeroki wachlarz zastosowań promieniowania synchrotronowego w wielu dziedzinach badań zarówno podstawowych jak i stosowanych wynika z wymienionych wyżej unikalnych cech tego promieniowania, a w szczególności z nadzwyczajnej intensywności w bardzo szerokim obszarze widmowym. Możliwość monochromatyzacji tego promieniowania dostarcza jedyne w swoim rodzaju narzędzia pozwalające na prowadzenie badań w zupełnie nowych rejonach poznawczych i technologicznych, które inaczej byłyby nieosiągalne.

W wielkim uproszczeniu: promieniowanie podczerwone może być wykorzystywane do badania oddziaływań molekularnych. Promieniowanie ultrafioletowe może służyć do badania struktury elektronowej i magnetycznej materii. Promieniowanie rentgenowskie można wykorzystywać do wyznaczania struktury nawet bardzo skomplikowanych układów takich jak białka czy wirusy oraz do trójwymiarowego obrazowania przedmiotów z niezwykle dokładnością przy użyciu tomografii synchrotronowej. Przy pomocy promieniowania synchrotronowego można nie tylko badać ale i wytwarzać: np. elementy mikro- i nano- elektroniczne technikami litograficznymi. Umożliwia to nadzwyczajny postęp w skali integracji procesorów, pamięci i obwodów scalonych oraz tworzenie nowych technologii w produkcji pamięci masowych. Możliwość uzyskania silnie skolimowanych wiązek promieniowania pozwala na budowanie mikroskopów pracujących w różnych zakresach długości fal. Tego typu mikroskopy obrazują strukturę badanych obiektów z dodatkową informacją, charakterystyczną dla danego obszaru widmowego.

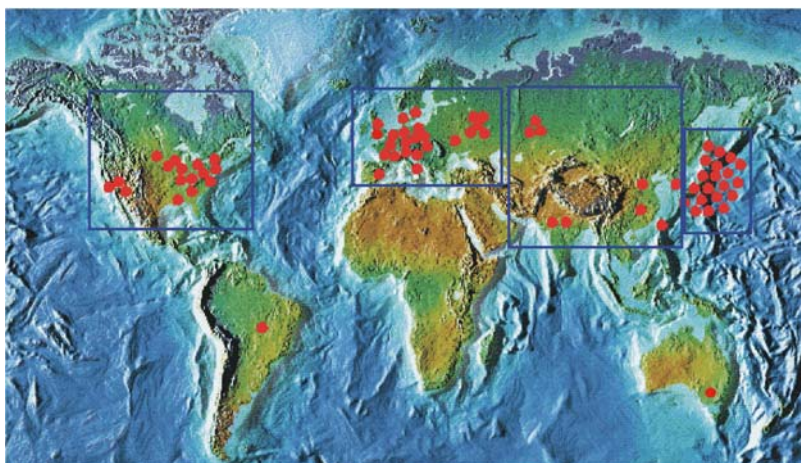
Przy źródłach promieniowania synchrotronowego, prowadzone są pomiary o olbrzymim znaczeniu dla wielu dziedzin: *fizyki, chemii, biologii, biofizyki, medycyny, fizyki materiałowej, biotechnologii, fizyki materiałowej, przemysłu półprzewodnikowego, nanotechnologii, geofizyki, ochrony środowiska* Tabela poniżej w bardzo skrótowy sposób zawiera przegląd zastosowań promieniowania synchrotronowego w różnych zakresach widma fal elektromagnetycznych.

Promieniowanie synchrotronowe					
Widmo energetyczne		Dziedziny zastosowania			
Długość fali (Å)	Energia fotonu (keV)	Biologia/Medycyna	Chemia	Fizyka	Technika
	0.1	Biochemia	Reakcje katalityczne	Struktura elektronowa ciał stałych	Nowe metody spektroskopii
	1	Biofizyka	Fotochemia	Własności powierzchni i powierzchni granicznych	Wysoko wydajna optyka
	10	Mikroskopia rentgenowska w b. krótkofalowym nadfiolecie „próżniowym”	Metody analizy chemicznej z zastosowaniem spektroskopii elektronowej	Fizyka atomowa i cząsteczkowa	Kalibracja promienia i wzorce
	100	Radiografia	Badanie uszkodzeń radiacyjnych	Spektroskopia fotoelektronowa	Badanie promieniowania „wigglerów” i „ondulatorów”
	1000	Wyznaczanie struktury biomolekuł i membran na powierzchniach wodnych	Wyznaczanie struktury polimerów	Optyka rentgenowska	Mikroskop rentgenowski
	10 000	Angiografia i tomografia rentgenowska	Analiza pierwiastków śladowych	Krystalografia z dyfrakcją promieniowania rentgenowskiego	Litografia rentgenowska
	100 000			Fluorescencja rentgenowska	Badanie materiałów
				Topografia	
				Nieelastyczne rozproszenie promieniowania rentgenowskiego	
				Rozproszenie Comptonowskie	

Ośrodki synchrotronowe skupiają naukowców reprezentujących różne dziedziny, którzy prowadzą interdyscyplinarne badania na styku wielu dyscyplin nauki i techniki oraz zastosowań aplikacyjnych. Coroczne sprawozdania ośrodków - źródeł promieniowania synchrotronowego dokumentują prowadzone w jednym laboratorium różnorodne badania podstawowe i choć raporty te zawierają tylko krótkie streszczenia prac ich objętość jest imponująca. Świadczy to o nadzwyczaj efektywnym wykorzystaniu aparatury naukowej udostępnianej w takich centrach.

2.4 Źródła promieniowania synchrotronowego na świecie

Pierwszą generacją synchrotronów wykorzystywanych jako źródła promieniowania elektromagnetycznego były akceleratory budowane jako *zderzacze* cząstek dla eksperymentów z zakresu fizyki wysokich energii. Promieniowanie synchrotronowe było w nich wykorzystywane w nieco „pasożytniczy” sposób. Wyniki uzyskiwane w tych badaniach doprowadziły w latach osiemdziesiątych do powstania drugiej generacji urządzeń, czyli synchrotronów od początku dedykowanych do wykorzystania promieniowania synchrotronowego. Urządzenia te mają zupełnie inny charakter niż synchrotrony pierwszej generacji. Są mniejsze i specjalnie dostosowane do pełnienia funkcji pierścieni akumulacyjnych z czasem życia cząstek dochodzącym do kilkudziesięciu godzin. Większość urządzeń budowanych od końca lat 80-tych należy do trzeciej generacji synchrotronów zawierających *‘insertion devices’* - wigglerzy i undulatory.



W chwili obecnej pracuje na świecie około sześćdziesięciu synchrotronów w kilkudziesięciu ośrodkach i ciągle przybywa nowych (np. SOLEIL – Francja, DIAMOND – UK, CANDLE – Armenia, SESAME – Jordania), ponieważ zapotrzebowanie na pomiary wykorzystujące metody oparte o promieniowanie synchrotronowe stale rośnie. Wszystko wskazuje na to, że ta tendencja utrzyma się w przewidywalnej przyszłości.

3 Korzyści wynikające z powstania Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego

3.1 Naukowe

W chwili obecnej około 150 polskich naukowców używa promieniowania synchrotronowego jako narzędzia w swoich badaniach naukowych. Zdecydowana większość z nich pracuje we współpracy z kolegami z zagranicznych ośrodków, którzy mają dostęp do źródeł promieniowania synchrotronowego i mają zainstalowane własne stanowiska pomiarowe. Uruchomienie synchrotronu w naszym kraju sprawi, że promieniowanie synchrotronowe stanie się dla nas łatwo dostępne.

Na świecie zaobserwowano efekt gwałtownego zwiększania się liczby naukowców używających promieniowania synchrotronowego wtedy, kiedy w ich krajach otwierany był pierwszy synchrotron. Należy oczekiwać, po uruchomieniu Polskiego Centrum Badań Synchrotronowych liczba polskich użytkowników szybko przekroczy 1000 osób. Wzrośnie też udział naukowców reprezentujących takie dziedziny nauki jak biologia, inżynieria materiałowa i medycyna, którzy dzisiaj w nikłym stopniu wykorzystują promieniowanie synchrotronowe jako narzędzie badawcze.

I nie chodzi tutaj tylko o wzrost ilościowy, ale – i może przede wszystkim – o szeroki dostęp do najnowocześniejszych, zaawansowanych technik badawczych, często w ogóle niemożliwych do zrealizowania bez synchrotronowego źródła promieniowania. To w oczywisty sposób rzutuje na jakość prac badawczych oraz poziom projektów zgłaszanych do ośrodków zagranicznych z których korzystanie w uzasadnionych merytorycznie przypadkach będzie lepiej przygotowane.

Ośrodki synchrotronowe skupiają naukowców reprezentujących różne dziedziny, którzy prowadzą interdyscyplinarne badania na styku wielu dyscyplin nauki i techniki oraz zastosowań. Coroczne sprawozdania ośrodków - źródeł promieniowania synchrotronowego dokumentują prowadzone w jednym laboratorium różnorodne badania podstawowe i choć raporty te zawierają tylko krótkie streszczenia prac ich objętość jest imponująca. Świadczy to o nadzwyczaj efektywnym wykorzystaniu aparatury naukowej udostępnianej w takich centrach.

3.2 Technologiczne – bezpośrednie i pośrednie

Uruchomienie źródła promieniowania synchrotronowego może w sposób bezpośredni i pośredni przyczynić się do unowocześnienia polskiego przemysłu. Dotychczasowe bezpośrednie zastosowania promieniowania synchrotronowego można z grubsza podzielić na dwa obszary: analizę chemiczną i analizę strukturalną służącą to testowania jakości i czystości materiałów oraz na produkcję mikrostruktur metodą litografii. Promieniowanie synchrotronowe pozwala analizować zawartość prawie wszystkich pierwiastków w różnych materiałach na poziomie kilku atomów na milion atomów matrycy. Z kolei duże natężenie promieniowania o dużej energii i bardzo dobrej kolimacji wykorzystuje się w produkcji skomplikowanych mikroukładów z materiałów metalicznych, organicznych i ceramicznych, które to układy są następnie wykorzystywane w chemii, biomedycynie i przemyśle.

Pośrednio budowa synchrotronu a zwłaszcza stowarzyszonych z nim linii eksperymentalnych będzie stanowiła wyzwanie dla polskiego przemysłu.

Uwagi na ten temat zawarte są w rozdziale o wykorzystaniu potencjału polskiego przemysłu w realizacji projektu.

3.3 Edukacyjne

Dostępność w kraju synchrotronowego źródła światła wpłynie w zasadniczy sposób poziom kształcenia w dziedzinach przyrodniczo-technicznych dając bezpośredni dostęp do najnowocześniejszych układów pomiarowych, a także możliwość ewentualnych udoskonaleń aparatury.

Ośrodki synchrotronowe to także ważne centra popularyzacji nauki. Synchrotron jest skomplikowanym urządzeniem natomiast samo korzystanie z promieniowania synchrotronowego jest stosunkowo łatwe. Zjawiska absorpcji, dyfrakcji i rozproszenia wykorzystywane w metodach pomiarowych łatwo wyjaśnić w poglądowy sposób. Dlatego idea eksperymentu jest na ogół zrozumiała dla początkującego eksperymentatora bez specjalnego i długotrwałego przygotowania. Różnorodność zjawisk zachodzących podczas oddziaływania promieniowania synchrotronowego z materią sprawia, że eksperymenty z tym promieniowaniem mają duże walory edukacyjne i mogą w znacznym stopniu wpłynąć na zainteresowanie nauką i podjęcie studiów w zakresie techniczno-przyrodniczym.

Zostało to zauważone w wielu krajach a w Japonii nawet do tego stopnia, że zbudowane zostały tam synchrotrony przy wyższych uczelniach całkowicie przeznaczone do celów edukacyjnych w procesie kształcenia inżynierów materiałowych, chemików, biofizyków i fizyków. Sprzyja temu fakt, że promieniowanie synchrotronowe może być wykorzystane równocześnie na wielu liniach pomiarowych bez przeszkadzania sobie nawzajem przez poszczególnych użytkowników.

3.4 Społeczne

Budowa synchrotronu i utworzenie Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego jako instytucji odpowiedzialnej za jego eksploatację wywoła wiele korzystnych zmian w sytuacji polskiego środowiska naukowego.

Centrum będzie pierwszym dużym krajowym ośrodkiem badań naukowych dostępnym bezpośrednio dla wszystkich obecnych i przyszłych polskich użytkowników promieniowania synchrotronowego. Ponieważ promieniowanie synchrotronowe używane jest w wielu różnych dziedzinach nauki, centrum będzie unikalnym ośrodkiem badań o charakterze interdyscyplinarnym.

Jednym z pozytywnych efektów będzie na pewno ożywienie współpracy między krajowymi ośrodkami naukowymi. Współpraca naukowa automatycznie przedłuży się na współpracę w dziedzinie kształcenia studentów, gdyż centrum będzie miejscem, w którym będą spotykali się studenci i doktoranci a także ich opiekunowie z różnych uczelni.

Niezwykle ważną będzie edukacja licznej grupy polskich młodych naukowców w dziedzinie wykorzystywania promieniowania synchrotronowego. Dopiero po zdobyciu doświadczenia w kraju będą mogli oni w pełni wykorzystać możliwości, jakie dają specjalistyczne źródła promieniowania synchrotronowego (Grenoble, ewentualnie Hamburg), w których Polska już wykupuje dostęp do promieniowania.

Ponieważ w sąsiadujących z Polską krajach Europy Środkowo-Wschodniej nie zbudowano jeszcze takich urządzeń, Centrum może stać się centrum regionalnym inspirującym współpracę naukową z sąsiednimi krajami.

3.5 Rola Narodowego Centrum Badawczego

Instytucja stwarzająca warunki i organizująca pracę użytkowników synchrotronu będzie spełniała ważną rolę na wielu płaszczyznach. Będzie spełniała swoją rolę jako:

Centrum naukowe – miejsce nowoczesnych, podstawowych i aplikacyjnych badań naukowych dysponujące najnowocześniejszą aparaturą.

Centrum interdyscyplinarne – ośrodek badań naukowych w wielu różnych dyscyplinach naukowych jak: inżynieria materiałowa, chemia, biologia, fizyka, biofizyka, geologia, mineralogia, medycyna i farmacja.

Centrum nowych technik pomiarowych. Własności promieniowania synchrotronowego stwarzają nie tylko nowe możliwości badawcze, ale również wyzwania opracowania nowych technik pomiarowych dając szansę realizacji twórczych możliwości młodej kadrze naukowców.

Centrum edukacyjne – miejsce kształcenia studentów i doktorantów a także przygotowujące młodych naukowców do pracy na innych wyspecjalizowanych zagranicznych synchrotronach.

Centrum krajowe. Instytucja o charakterze ogólnopolskim spowoduje ożywienie współpracy między krajowymi ośrodkami naukowymi.

Centrum regionalne – ośrodek, który będzie naturalnym miejscem współpracy naukowej z krajami regionu Europy Środkowo Wschodniej.

Centrum międzynarodowe – ośrodek współpracy z naukowcami innych krajów, który uczyni tą współpracę mniej jednostronną a bardziej partnerską.

4 Ocena oddziaływania na środowisko

Synchrotron jest dużym urządzeniem, które instaluje się w budynku o charakterze hali o rozmiarach (średnica, ewentualnie długość boku) dochodzących do 100 metrów. Zasilany jest energią elektryczną o mocy do około 3MW. Do chłodzenia pomp i magnesów potrzebna jest woda, na ogół krążąca w zamkniętym obwodzie. Podczas pracy synchrotronu nie zużywa się innych materiałów. Nie wydzielają się też żadne związki chemiczne. Z punktu zanieczyszczeń chemicznych to urządzenie jest neutralne dla środowiska naturalnego.

Podstawowy proces zachodzący w synchrotronie to przyspieszanie elektronów do energii około 3 GeV (około 50 000 razy większej od energii elektronów w lampie rentgenowskiej) i gromadzenie ich w pierścieniu akumulującym, gdzie krążą i emitują promieniowanie synchrotronowe.

Duże natężenie wiązki elektronów i w konsekwencji duże natężenie promieniowania elektromagnetycznego wokół pierścienia akumulacyjnego sprawia, że strefa wewnątrz pierścienia jest strefą zagrożenia radiologicznego. Dlatego, tak jak na wszystkich dużych synchrotronach pierścień akumulujący osłonięty powinien być osłoną z lekkiego betonu o grubości kilkudziesięciu centymetrów. Stanowiska pomiarowe znajdujące się poza osłoną są wtedy całkowicie bezpieczne. Nie mniej jednak pracownicy, naukowcy wykonujący pomiary i wszyscy wchodzący do pomieszczenia synchrotronu pozostają pod kontrolą dozymetryczną.

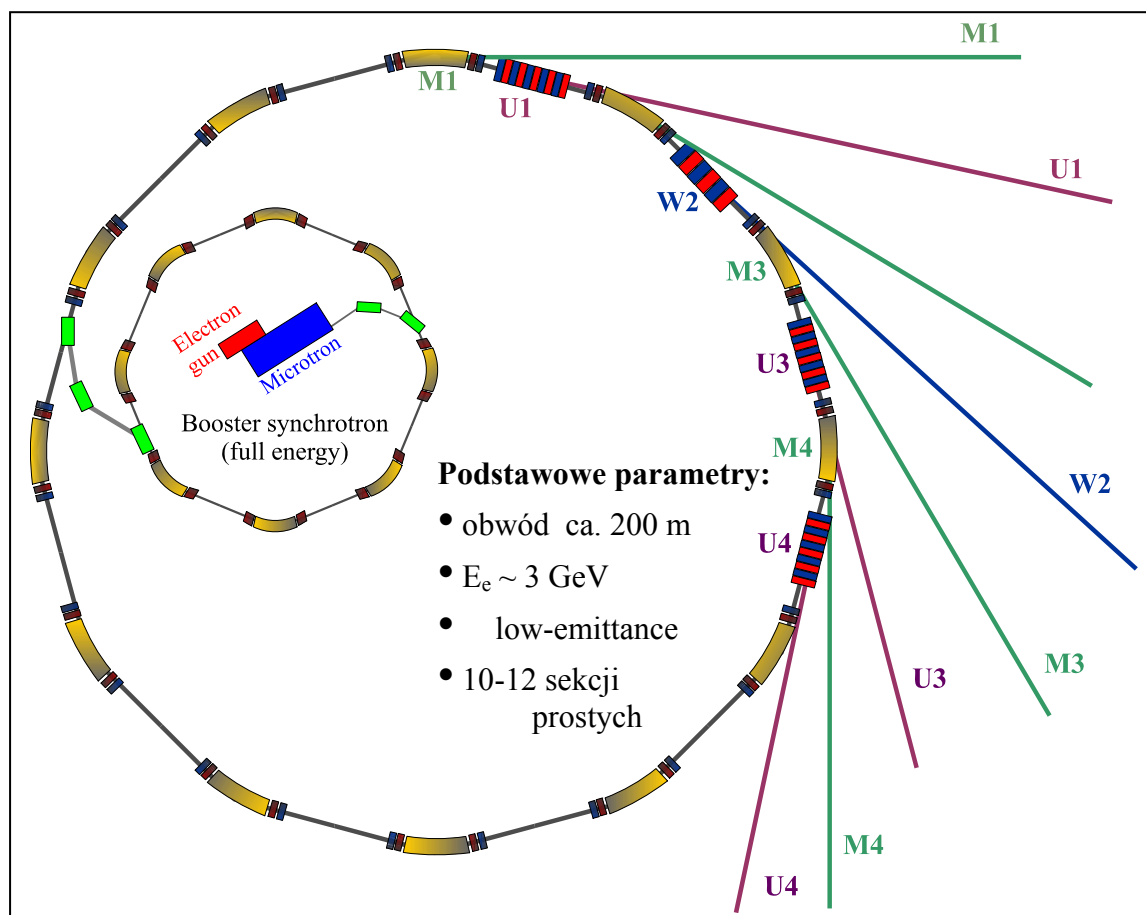
W zasadzie wszelkie zagrożenie znika w chwili wyłączenia synchrotronu tak jak znika zagrożenie w pomieszczeniu aparatu rentgenowskiego, gdy jest on wyłączony. Ze względu jednak na dużą energię elektronów należy dodatkowo rozważyć skutki, jakie mogą zaistnieć gdyby rozogniskowana wiązka elektronów skierowana została w kierunku ścianek pierścienia akumulującego. Prawdopodobieństwo zmiany składu nukleonów w jądrze w wyniku zderzenia z elektronem jest znikomo małe. Doświadczenia z pracy akceleratorów w innych ośrodkach badawczych wskazuje, że nie jest to realne zagrożenie radiologiczne.

5 Podstawowe założenia techniczne projektu

Używane w niniejszym raporcie, jak również w języku potocznym, określenie ‘synchrotron’ jest pewnym skrótem i w istocie obejmuje złożony system obejmujący szereg podukładów pośród których właściwy synchrotron (*booster-synchrotron*) - akcelerator cząstek naładowanych - jest jednym z elementów. Te zasadnicze podsystemy to:

- źródło elektronów,
- przyspieszacz wstępny (*microtron*),
- akcelerator cząstek naładowanych (*booster-synchrotron*),
- pierścień akumulujący (*storage ring*),
- elementy generujące promieniowanie synchrotronowe (zintegrowane z pierścieniem akumulującym) – magnesy odchylające (*bending magnets*), wiggler (*wigglers*), undulatory (*undulators*).
- właściwe linie eksperymentalne (*beamlines*) zakończone stacjami pomiarowymi (*end-stations*).

Proponowane we wniosku parametry synchrotronu wynikają z przeprowadzonej analizy dotychczasowego i prognozowanego zapotrzebowania polskiego i środkowo-europejskiego środowiska naukowego na metody badawcze bazujące na promieniowaniu synchrotronowym.



5.1 Układy przyspieszające: microtron, booster-synchrotron

Praktycznie monopolistą w produkcji takich urządzeń jest firma duńska DANFYSIK. Zdjęcie przedstawia system przyspieszania wstępnego zrealizowany przez tę firmę dla synchrotronu ANKA w Karlsruhe.

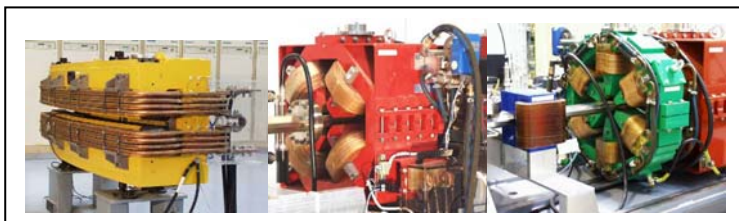


5.2 Pierścień akumulujący (magazynujący)

Występują tutaj grupy zaawansowanych zagadnień technicznych, których rozwiązanie i opracowanie wymaga utworzenia zespołów roboczych złożonych z najwyższej klasy specjalistów. Jednym z zasadniczych wymagań jest aby projektowany pierścień akumulujący zapewniał niską wartość parametru emitancji (*low-emittance*).

Zasadnicze podsystemy obejmują:

- układy wysokiej i ultrawysokiej próżni,
- optyki elektronowej,
- zasilania wysokoczęstotliwościowego dużej mocy,
- ochrony radiologicznej,
- informatycznego systemu sterowania i zabezpieczeń,
- elementy generujące PS (*insertion devices*),
- układy diagnostyki wiązki elektronowej.



5.3 Linie eksperymentalne – etap I

Zasadnicze przesłanki techniczne wymagają sukcesywnego włączania do testowania i eksploatacji kolejnych linii eksperymentalnych. W niniejszym rozdziale przedstawiamy propozycje stacji pomiarowych, które mogłyby być zbudowane przy siedmiu liniach eksperymentalnych realizowanych w pierwszej kolejności (etap I). Taki wybór linii wskazanych do konstrukcji w fazie początkowej eksploatacji synchrotronu wynika z oceny zainteresowania i przygotowania polskiego środowiska naukowego do prowadzenia określonego typu badań. Jest rzeczą oczywistą, że dostępność takiego narzędzia w Polsce spowoduje zarówno ilościowe jak i jakościowe poszerzenie wykorzystania technik opartych o promieniowanie synchrotronowe. W rozdziale 5.4 przedstawiono konkretne, już bardzo dojrzałe propozycje dalszej rozbudowy infrastruktury pomiarowej synchrotronu (etap II).

5.3.1 Linia M1: Wysokorozdzielcza rentgenowska spektroskopia absorpcyjna i emisyjna w zakresie wysokich energii

Źródło:	magnes odchylający	Zakres energii fotonów:	4 – 30 keV
Koordynator: Krystyna Ławniczak-Jabłońska (Instytut Fizyki PAN)			

Podstawy naukowe

Każda zmiana fizyczna, chemiczna czy biochemiczna materii jest konsekwencją redystrybucji ładunku wokół atomów wchodzących w skład obiektu. Informacja o strukturze elektronowej materii jest więc niezwykle istotna dla poznania i projektowania własności materii. Struktura elektronowa decyduje o tym, że materia ma określone ułożenie atomów, a więc przyjmuje określoną strukturę molekularną i krystaliczną. Technika, która pozwala wyznaczać jednocześnie strukturę elektronową i geometryczne ułożenie atomów materii jest rentgenowska spektroskopia absorpcyjna (RSA). Jest więc ona niezwykle przydatna do rozwiązywania wielu problemów związanych z poznaniem fundamentalnych własności fizycznych, chemicznych oraz biochemicznych badanych obiektów. Technika ta może być stosowana dla wyznaczania lokalnej struktury atomowej i struktury elektronowej szerokiej klasy materiałów.

Krótką charakterystyka RSA:

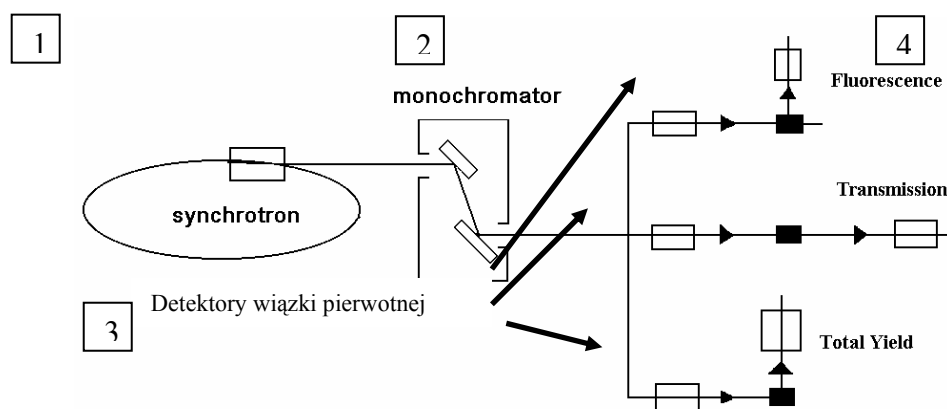
- Spektroskopia ta może być stosowana do badania zarówno gazów, cieczy, materiałów amorficznych i krystalicznych oraz do próbek biologicznych.
- Jest techniką selektywną - wybiera jeden rodzaj atomów (np. ten szczególnie ważny dla fizycznych, chemicznych czy biologicznych własności materiału) poprzez wybór odpowiedniej energii promieniowania równej krawędzi absorpcji.
- Rozciągnięta subtelna struktura krawędzi absorpcji - EXAFS (z ang. Extended X-ray Absorption Fine Structure) dostarcza informacji o lokalnej strukturze atomowej, a więc o geometrycznym ułożeniu atomów w bezpośrednim sąsiedztwie wybranego rodzaju atomów.
- Struktura bliska krawędzi absorpcji - XANES (z ang. X-ray Absorption Near Edge Structure) dostarcza informacji o walencyjnych nie zapełnionych orbitach w wybranym atomie. Orbitale walencyjne odpowiadają za formowanie wiązań, zrywanie lub zmianę rodzaju wiązań. Tak więc dostarczają informacji o zmianie konfiguracji elektronowej, która prowadzi do zmian strukturalnych. W szczególności analizując strukturę XANES możemy wyznaczyć stopień utlenienia atomu (stan jonowy) oraz stopień zapełnienia orbitali walencyjnych. Ponadto w przypadku atomów ułożonych w strukturę

uporządkowaną istnienie lokalnej symetrii może zaburzyć dipolowe reguły wyboru i stąd możemy również wnioskować o rodzaju ułożenia atomów.

- Struktura XANES jest „odciskiem” wiązania chemicznego może więc służyć do identyfikacji związków chemicznych występujących w badanym materiale.
- W materiałach wielofazowych struktura XANES jest liniową kombinacją struktur od poszczególnych faz i może służyć do określenia procentowego udziału poszczególnych faz w tych materiałach.
- W materiałach o dobrze zorientowanej strukturze krystalograficznej (warstwach czy monokryształach) wykorzystując naturalną liniową polaryzację wiązki synchrotronowej można wyznaczać anizotropię wiązań chemicznych wynikającą z anizotropii struktury krystalicznej, rozłożenia defektów czy intencjonalnie wprowadzonych domieszek, bądź z magnetycznych przemian fazowych.
- Uporządkowanie magnetyczne materiału oraz wielkość spinowego i orbitalnego momentu magnetycznego można badać stosując wiązkę promieniowania synchrotronowego spolaryzowaną kołowo.

Dostępność promieniowania synchrotronowego spowodowała gwałtowny rozwój rentgenowskiej spektroskopii absorpcyjnej. Promieniowanie to zapewniło możliwość zmiany energii, która jest niezbędna do pomiaru widm jak i duże natężenie promieniowania w szerokim zakresie zmian energii. Dzięki rozwojowi technik monochromatyzacji wiązki zdolność rozdzielcza spektrometrów do pomiaru widm emisyjnych i absorpcyjnych osiąga poziom $\Delta E/E = 10^{-4}$. Rozwojowi metod eksperymentalnych towarzyszył szybki rozwój teorii opisujących z pierwszych zasad proces absorpcji promieniowania oraz szybki rozwój mocy obliczeniowej komputerów. Współczesne metody teoretyczne i pakiety programów do analizy widm pozwalają symulować widma dla złożonych układów atomów za pomocą średniej klasy komputerów PC. Wszystko to decyduje o stale rosnącej liczbie naukowców zainteresowanych tą techniką.

Podstawowe założenia budowy uniwersalnej linii badawczej dla wysokorozdzielczej spektroskopii absorpcyjnej i emisyjnej - niezbędne elementy takiej linii:



▪ Źródło promieniowania rentgenowskiego:

Do większości zastosowań wysokoenergetycznej spektroskopii absorpcyjnej wystarcza promieniowanie z magnesów uginających o zakresie energii fotonów od 4 keV do 30 keV. Promieniowanie synchrotronowe jest naturalnie spolaryzowane liniowo co umożliwia badania

anizotropii wiązań atomowych w dobrze zorientowanych próbkach krystalicznych. Dostępne są obecnie elementy optyczne wprowadzające polaryzację kołową, która umożliwi badanie własności magnetycznych materii. Opcję tą należy traktować jako dodatkową. Większość pomiarów magnetycznych prowadzi się przy mniejszych energiach wiązki, gdyż obserwuje się wtedy większe efekty.

- **Monochromatory:**

Monochromator krzemowy Si (111) o 2 lub 4 kryształach (konfiguracja w której pozycja wiązki jest niezmienna w funkcji energii) oraz monochromator krzemowy Si (311) pozwalający uzyskać wyższe energie wiązki. Energetyczna zdolność rozdzielcza monochromatorów powinna być rzędu $\Delta E/E = 10^{-4}$.

- **Długość linii:**

Konieczne jest miejsce dla ustawienia monochromatora, detektorów rejestrujących natężenie wiązki pierwotnej, przesłon i optyki kształtującej wiązkę, stolika z manipulatorem do zamontowania próbek oraz detektorów. Długość stanowiska pomiarowego powinna wynosić około 10 m. Odległość od magnesu uginającego powinna wynosić około 50 m.

- **System próżniowy:**

System próżniowy linii powinien być niezależny od próżni w pierścieniu akumulacyjnym, z możliwością modułowego zapowietrzania (odpompowywania) poszczególnych bloków na stanowisku pomiarowym. Kriostat helowy (zakres temperatur: 3-300K), ew. przystawka wysokotemperaturowa. Pożądana jest budowa modułowa z możliwością instalowania własnych urządzeń w miejscu próbki (pomiędzy 1 i 2 komorą jonizacyjną). Trzecia komora jonizacyjna powinna umożliwić jednoczesny pomiar dla próbek referencyjnych.

- **Detekcja wiązki pierwotnej**

Detekcja wiązki pierwotnej za pomocą komór jonizacyjnych. Wszystkie komory powinny mieć możliwość regulowania i kontroli ciśnienia oraz rodzaju gazów je wypełniających w celu umożliwienia optymalnej jonizacji gazów dla danej energii promieniowania.

- **Detekcja wiązki wtórnej**

W celu umożliwienia badania szerokiej gamy próbek niezbędny jest zestaw różnorodnych detektorów w tym:

1. dwie komory jonizacyjne do badań transmisji
2. wieloelementowy krzemowy lub germanowy detektor fluorescencyjny
3. detektor elektronów wtórnych
4. diody krzemowe
5. pomiar prądu z próbki.

Przykłady badań za pomocą rentgenowskiej spektroskopii absorpcyjnej nowych materiałów wytwarzanych przez współczesne technologie

Materiały stosowane we współczesnej technologii są coraz bardziej złożone i coraz trudniej charakteryzować ich strukturę elektronową i atomową. Niezbędne staje się więc stosowanie technik, które pozwalają uzyskać informacje oddzielnie o strukturze i atomowym otoczeniu każdego elementu wchodzącego w skład badanego materiału. Rentgenowska spektroskopia absorpcyjna (RSA) jest jedyną metodą dostarczającą informacji o strukturze elektronowej i atomowej selektywnie dla każdego pierwiastka wchodzącego w skład materiału i oddzielnie dla

każdej symetrii stanów elektronowych. Przydatność tej techniki do badań współczesnych materiałów zilustrowano na przykładzie badań prowadzonych w Instytucie Fizyki PAN.

Wyznaczono anizotropię wiązań atomowych w strukturze niebieskiego lasera tworzonego na bazie azotków grupy III

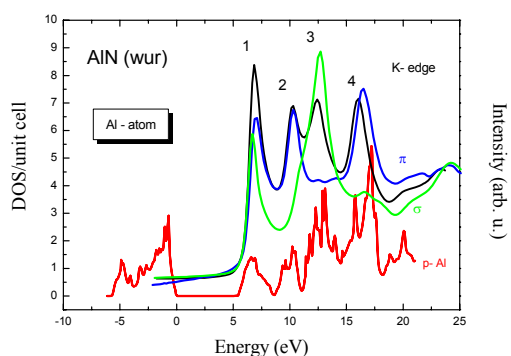
Zainteresowanie azotkami grupy III i ich unikatowymi własnościami nie maleje z powodu ich zastosowania w technologii niebieskiego lasera oraz w produkcji wysokotemperaturowych i dużej mocy urządzeń elektronicznych. Chociaż wyprodukowano już działające przyrządy na bazie tych materiałów to opracowanie stabilnej i ekonomicznej technologii wymaga dokładnego poznania ich własności. Zrozumienie podstawowych procesów fizycznych decydujących o tych zastosowaniach jest wciąż jeszcze niepełne. Jednym z powodów jest niedostateczna znajomość struktury elektronowej tych półprzewodników uważanych za nietypowe w porównaniu z klasycznymi materiałami z grupy III-V. Poza BN pozostałe azotki krystalizują w stabilnej strukturze wurcytu oraz metastabilnej strukturze blendy cynkowej. We wszystkich rozpatrywanych materiałach i dla obydwu struktur anion azotu otoczony jest 4 kationami i tworzy bardzo krótkie silne wiązanie. W porównaniu z wiązaniami w innych materiałach III-V jest ono o około 20% krótsze (np. 1.95 Å w GaN i 2.7 Å w GaAs) a jonowość wiązania jest dwa razy większa. Wurcytowa struktura krystaliczna GaN jest dobrze znana i opisana w literaturze, jednak długość wiązań anion-kation nie była do tej pory bezpośrednio mierzona. Dwa rodzaje wiązań tworzą się w strukturze wurcytowej. Jedno, dłuższe (a więc i słabsze) wiązanie wzdłuż osi c oraz trzy wiązania krótsze (silniejsze) w płaszczyźnie ab . Zmiana długości wiązania powinna wpływać na zmianę stopnia jonowości i anizotropię wiązań tworzonych w rozpatrywanych kierunkach. Warto tu zaznaczyć, że kierunki te są również wyróżnione w konstrukcji lasera. Warstwy tworzące laser rosną w płaszczyźnie ab wzdłuż osi c kryształu. Nie udało się uzyskać wydajnej akcji laserowej na tych materiałach w oparciu o strukturę blendy cynkowej. Pomimo dużego zainteresowania tymi materiałami istnieje stosunkowo mało doniesień o eksperymentalnych badaniach dotyczących struktury elektronowej w szerokim zakresie energii. W pracach [1-5] podjęto systematyczne eksperymentalne i teoretyczne badania rzutowanych na poszczególne atomy i orbitale gęstości stanów elektronowych azotków grupy III wzdłuż płaszczyzny ab (krzywe σ na rys.1) i osi c (krzywe π na rys.1) w wurcytowych i kubicznych warstwach epitaksjalnych [1-3].

Kształt widm rentgenowskich jest odciskiem wiązania chemicznego i pozwala zidentyfikować chemiczną naturę tworzonego wiązania dla wybranego atomu w różnych związkach. Proces absorpcji i emisji kwantu rentgenowskiego wiąże się z przejściem optycznym atomu pomiędzy dwoma stanami energetycznymi w badanym związku. Umożliwia to interpretację rejestrowanego widma w oparciu o gęstości obsadzonych stanów elektronowych (pasmo walencyjne np. rys. 1b) dla widm emisyjnych i gęstości niezajętych stanów elektronowych (pasmo przewodnictwa rys. 1a i b) dla rentgenowskich widm absorpcyjnych. Przejściem elektronu związanym z powstawaniem widma rządzą dipolowe reguły wyboru, tak więc rentgenowskie badania spektroskopowe zapewniają orbitalną rozdzielczość. Naturalna liniowa polaryzacja promieniowania synchrotronowego umożliwia dodatkowo separację udziału poszczególnych atomów i orbitali w wybranych kierunkach krystalograficznych, a więc umożliwia badanie anizotropii tworzonych wiązań chemicznych [4,5].

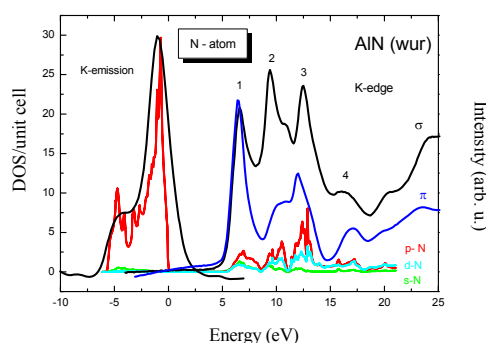
Zmierzono widma emisyjne i absorpcyjne dla pierwiastków wchodzących w skład azotków grupy III. Strukturę obserwowaną w widmach porównano bezpośrednio z obliczeniami gęstości stanów elektronowych wykonanymi metodą LMTO. Tylko w przypadku heksagonalnego BN zaobserwowano wpływ niewystarczającego ekranowania dziury na poziomie wewnętrznym na

obserwowany rozkład gęstości stanów. Dla pozostałych materiałów zgodność obliczeń ze strukturą widma była bardzo dobra.

Stwierdzono silną anizotropię rozkładów stanów elektronowych w badanych materiałach oraz znaczne różnice w ich energii wiązania, a więc różne położenie dna pasma przewodnictwa. W przypadku GaN liczba dostępnych stanów w obu kierunkach okazała się porównywalna, ale w kierunku c rozłożona bardziej symetrycznie niż wzdłuż złącza. Zupełnie inny rozkład stanów elektronowych stwierdzono w AlN i InN. Liczba stanów elektronowych w kierunku c (π) jest dwukrotnie mniejsza niż w płaszczyźnie c (σ).



Rys.1a Widmo absorpcyjne K atomów Al w AlN heksagonalnym wzdłuż płaszczyzny c (σ) oraz kierunku c (π). Krzywa czarna widmo mierzone pod kątem 45° uśredniające efekty polaryzacji.



Rys. 1b Widmo emisyjne i absorpcyjne K atomów azotu w heksagonalnym AlN. Oznaczenia krzywych jak w rys. 1a.

Zaobserwowana anizotropia rozkładów stanów przewodnictwa rzuca nowe światło na procesy fizyczne zachodzące w urządzeniach optoelektronicznych budowanych z trójskładnikowych stopów tych materiałów podobnie jak anizotropia stanów elektronowych tlenu obserwowana w wysokotemperaturowych nadprzewodnikach.

[1] „X-ray absorption, glancing angle reflectivity, and theoretical study of the N-K and Ga- M edge spectra in GaN”, W.R.L. Lambrecht, S.N. Rashkeev, B.Segall, K.Lawniczak-Jablonska, T. Suski, E.M. Gullikson, J.H. Underwood, R.C.C. Perera, J.C. Rife, I. Gregory, S. Porowski, D.K. Wickenden, Phys. Rev. **B55**, 1997, 2612.

[2] "Anisotropy of the nitrogen conduction states in the group III nitrides studied by polarized x-ray absorption", K.Lawniczak-Jablonska, T. Suski, Z. Liliental-Weber, E.M. Gullikson, J.H. Underwood, R.C.C. Perera, T. J. Drummond, Appl. Phys. Letter **70**, 1997, 2711.

[3] „Electronic States in Valence and Conduction Bands of Group III Nitrides: experiment and theory”, K. Lawniczak-Jablonska, T. Suski, I. Gorczyca, N.E. Christensen, K. E. Attenkofer, E.M. Gullikson, J.H. Underwood, D. L. Ederer and R.C.C. Perera, Z. Liliental-Weber, Phys. Rev. B **61**, 16623-16632, 2000.

[4] “Anisotropy of atomic bonds formed by p-type dopants in bulk GaN crystals”, K. Lawniczak-Jablonska, T. Suski, I. Gorczyca, N.E. Christensen, J. Libera, J. Kachniarz, P. Lagarde, R. Cortes and I. Grzegory, Apply Phys. A **75** (2002) 577-583

[5] „Polarization dependent x-ray absorption studies of the chemical bonds anisotropy in wurtzite GaN grown at different conditions”, K. Lawniczak-Jablonska, R.J. Iwanowski, I. V. Demchenko, T. Boettcher, S. Einfeldt D. Hommel, R. Cortes and R. C. C. Perera, J. Alloy and Compounds, vol. 328, 77, 2001.

Określono przyczynę ograniczonej rozpuszczalności metali przejściowych w półprzewodnikach z szeroką przerwą z grupy II-VI [6-8]

Wynikiem prowadzonych badań było stwierdzenie, że elektrony 3d domieszkowanych metali przejściowych uczestniczą w jonowo-kowalencyjnym wiązaniu w matrycy ZnS i ZnSe.

Zaobserwowano zmiany struktury elektronowej zarówno w stanach typu s i p siarki i selenu jak i stanach typu p i d metalu przejściowego oraz stanach p cynku. Ponadto stwierdzono, że udział elektronów 3d w wiązaniu maleje z zapelnianiem się orbity 3d. Gdy rośnie zapelnienie orbity 3d (Mn - d^5 , Ni - d^9) maleje ładunek elektronowy uczestniczący w wiązaniu określony z przesunięcia energetycznego krawędzi absorpcji serii K, oraz mniejsze są zmiany rozkładu ładunku przy wszystkich atomach uczestniczących w wiązaniu i we wszystkich badanych symetriach stanów. Stwierdzono więc, że wraz ze wzrostem zapelnienia orbity 3d metali przejściowych przyjmuje ona coraz bardziej atomowy charakter i coraz mniej uczestniczy w jonowo-kowalencyjnym wiązaniu matrycy. Wyjaśnia to drastyczny spadek rozpuszczalności metali przejściowych w badanych matrycach (Mn $x=0.6$, Ni $x=0.03$).

Badając długość wiązań atomowych pomiędzy różnymi kationami i anionem stwierdzono, wyraźną asymetrię wiązań niezależną od stężenia domieszkowanego metalu.

Różnica długości wiązań zależy jedynie od rodzaju domieszki a nie od rodzaju anionu. Jest ona największa dla Mn (0.08 Å), dla Fe wynosi 0.02 Å natomiast już dla Co długość wiązania pomiędzy Co i S czy Se jest krótsza niż pomiędzy Zn a S czy Se o 0.02 Å. Tak więc rozpuszczalność pierwiastka nie zależy od różnicy pomiędzy promieniami kowalencyjnymi kationów w matrycy i wielkości deformacji jaką wprowadza domieszka do struktury krystalicznej matrycy (deformacja ta jest największa dla Mn najmniejsza dla Co).

Przeprowadzone badania wykazały więc jednoznacznie, że rozpuszczalność metali 3d w półprzewodnikach II-VI zależy od stopnia hybrydyzacji stanów 3d ze stanami elektronowymi matrycy. Stopień hybrydyzacji tych stanów zależy natomiast od zapelnienia powłoki 3d.

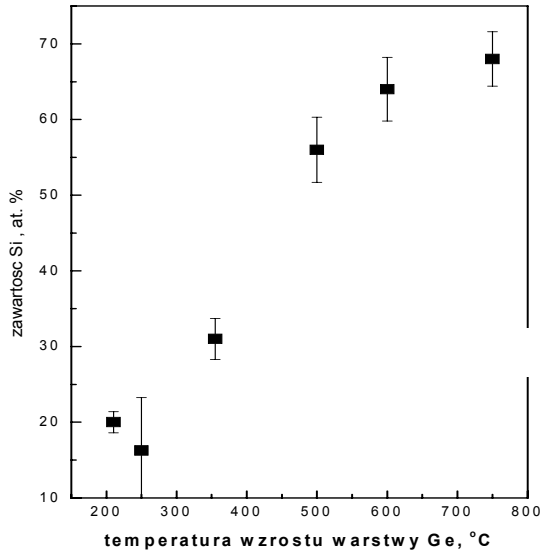
[1] "Local electronic structure of ZnS and ZnSe doped by Mn, Fe, Co and Ni from X-ray absorption near-edge structure studies", K. Lawniczak-Jablonska, R.J. Iwanowski, Z. Gołacki, A. Traverse, S. Pizzini, A. Fontaine, I. Winter and J. Hormes, Phys. Rev **B53**, 1996, 1119.

[2] "Hybridization of the 3d states of transition metals with the states of the ZnS matrix", K. Lawniczak-Jablonska, R.C.C. Perera, J.H. Underwood, E.M. Gullikson, R.J. Iwanowski, Phys. Rev. **B55**, 1997, 10376.

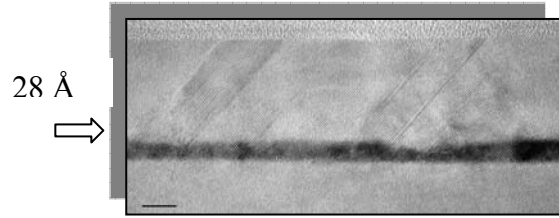
[3] "Tetrahedral covalent radii of Mn, Fe, Co and Ni estimated from extended X-ray absorption fine structure studies", R.J. Iwanowski, K. Lawniczak-Jablonska, Z. Gołacki and A. Traverse, Chem. Phys. Lett. **283**, (1998) 313.

Struktury niskowymiarowe

Istnieje potrzeba opracowania metod doświadczalnych pozwalających wyznaczyć skład pierwiastkowy w tworzonych we współczesnych technologiach strukturach niskowymiarowych. Struktury te mają zazwyczaj zbyt małe rozmiary (rzędu dziesiątek nanometrów) aby można było zastosować klasyczne metody mikroanalizy rentgenowskiej, spektroskopii fotoemisyjnej, Augera czy spektroskopii masowej. Również metody mikroskopii elektronowej zawodzą. Za pomocą techniki EXAFS określono zawartość Si w kropkach kwantowych tworzących się w zagrzebanych warstwach Ge o różnej grubości i nanoszonych na podłożu Si w różnej temperaturze. Wykazano, że stopień dyfuzji Si do struktur Ge jest silnie skorelowany z temperaturą osadzania warstwy (rys. 2). Na podstawie badań AFM wykonanych na podobnej klasie próbek oraz lokalnych badań TEM wykonanych na tych samych próbkach oszacowano ich średnie rozmiary. Pozwoliło to na określenie udziału powierzchni kropki w wyznaczonej całkowitej koncentracji Si wokół atomów Ge. Wykazano, że dla niskich temperatur (210 °C) udało się utworzyć kropki w których krzem dyfunduje tylko do dwóch pierwszych mono-warstw wokół kropki. Jądro kropki zawiera jedynie Ge. W strukturach nanoszonych w wyższych temperaturach kropki mają znacznie większe rozmiary, a zawartość Si przekracza nawet 50%. Ponadto określono stopień i rodzaj naprężeń występujących w utworzonych strukturach germanowych. Wykazano, że metoda EXAFS może dostarczyć unikatowych informacji o lokalnej strukturze atomowej w przykrytych warstwach.



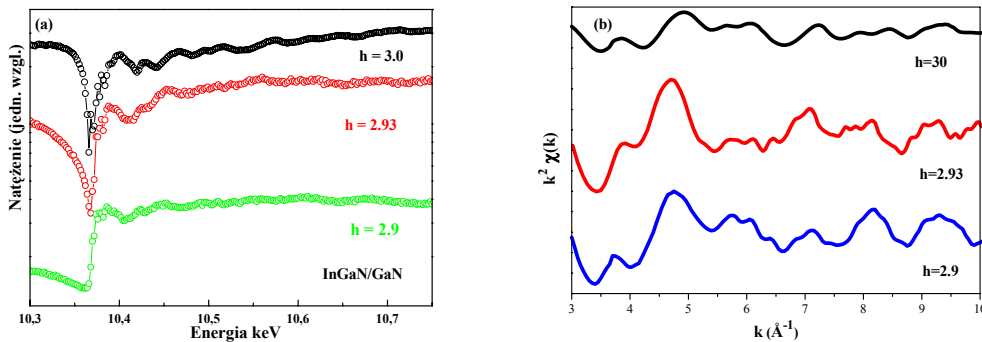
Rys. 2 Średnia zawartość Si w pierwszej strefie koordynacyjnej Ge wyznaczona z analizy widm EXAFS krawędzi K Ge, dla warstw Ge nanoszonych techniką MBE na podłoże Si (001) o różnej temperaturze.



Wysokorozdzielczy obraz TEM dla 28. Å warstwy Ge zagrzebanej w Si.

- [1] " The local microstructure of Ge layers buried in silicon crystal studied by extended X-ray absorption fine structure ", I.N. Demchenko, K.Lawniczak-Jablonska, K.S.Zhuravlev, E.Piskorska, A.I.Nikifirov and E. Welter, Journal of Alloys and Compounds 362(1-2), 156, 2004.
- [2] "Characterization of the local structure of Ge quantum dots by X- ray absorption", I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, E. Piskorska, K.S. Zhuravlev, E. Welter, Journal of Alloys and Compounds, 382, 206-210 (2004).
- [3] "XAFS and HRTEM analysis applied for explanation of optical properties of Ge(Si) self-assembled islands buried in silicon matrix", I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, S. Kret, M. Zak, A. Szczepanska, A. V. Novikov, A. N. Yablonskiy and Z. F. Krasilnik, J-Y. Laval, submitted Appl. Phys. Lester (2006)

Kolejnym krokiem w rozwoju technik synchrotronowych jest łączenie różnych metod. Przykładem takiej metody jest subtelna struktura anomalnej dyfrakcji - DAFS (z ang. diffraction-anomalous-fine-structure). Metoda ta łączy zalety dyfrakcji i absorpcji rentgenowskiej, co stwarza możliwość wyznaczenia lokalnego składu chemicznego struktur niskowymiarowych. Widmo DAFS rejestruje się podobnie jak EXAFS (rys. 3) ale przy jednoczesnym spełnieniu warunku dyfrakcji. Oznacza to, że informacje uzyskuje się z obszaru spełniającego określony warunek dyfrakcji, a więc z obszaru badanej próbki o określonym naprężeniu sieci i składzie chemicznym [12-14].



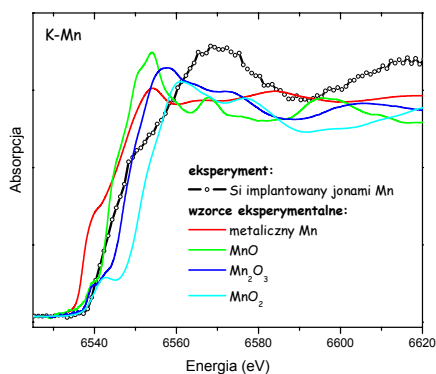
Rys. 3. a) Widmo eksperymentalne zarejestrowane dla K krawędzi Ga w strukturze niskowymiarowej InGaN/GaN dla różnych wartości wektora sieci odwrotnej q_r . Uzyskana informacja pochodzi z obszarów o różnym składzie chemicznym, odpowiednio $h=3.0$ - podstawa, $h=2.9$ - środek, $h=2.93$ - wierzchołek ukształtowanych kropek kwantowych; b) wyodrębnione z widma eksperymentalnego oscylacje EXAFS przedstawione w przestrzeni wektora falowego k . Procedura analizy wyodrębnionych oscylacji EXFAS odbywa się w sposób standardowy.

- [1] “Diffraction-anomalous-fine-structure spectroscopy applied to the study of II-V strained semiconductors”, M. G. Proietti et al., Phys. Rev. B **59**, 5479-5492 (1999).
 [2] “Diffraction Anomalous Fine Structure: A New X-Ray Structural Technique”, H. Stragier et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 3064- 3067 (1992).
 [3] “Diffraction Anomalous Fine Structure investigation of InGaN quantum dots”, E. Piskorska, V. Holý, M. Siebert, B. Krause, T. H. Metzger, T. Schmidt, J. Falta, T. Yamaguchi, D. Hommel, Physica Status Solidi C, 1662-1666 (2006).

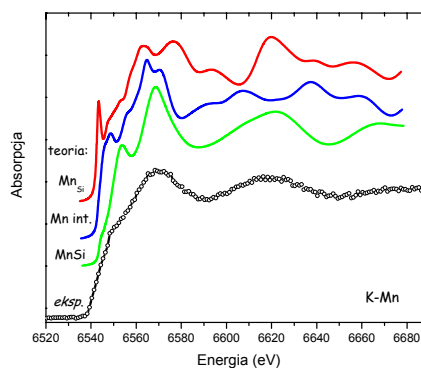
Materiały interesujące dla spintroniki

Możliwość wykorzystania spinu elektronu w urządzeniach półprzewodnikowych otwiera drogę do wytwarzania urządzeń elektronicznych dużo szybszych niż te, które istnieją obecnie. Wśród potencjalnych zastosowań spintroniki wymienia się m.in. komputery kwantowe, ale także lasery i pamięci komputerowe nowego typu. Trwają więc intensywne prace technologiczne nad wytworzeniem nowych materiałów o odpowiednich własnościach. Duży nacisk kładzie się na badania tzw. rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych, jak np. GaAs domieszkowany atomami manganu. Inną metodą uzyskania ferromagnetyzmu w kryształach półprzewodnikowych jest implantacja. Krzem implantowany jonami manganu wydaje się być dobrym kandydatem. Poważną zaletą potencjalnych urządzeń opartych na tym materiale byłaby łatwość integracji z już istniejącą technologią.

Poniżej pokazano przykład wyznaczenia położenia zaimplantowanego Mn w sieci Si oraz jego najbliższego otoczenia. Analiza bliskiej krawędzi absorpcji (XANES) przeprowadzona została przy pomocy dwóch komplementarnych metod czyli porównania widma badanej próbki z widmami znanych próbek referencyjnych oraz porównania krzywej eksperymentalnej z krzywymi uzyskanymi z obliczeń teoretycznych przy pomocy programu FEFF8.



Rys. 4 Widmo XANES Mn zaimplantowanego w Si oraz widma tlenków Mn i metalu.



Rys. 5 Widmo Mn zaimplantowanego oraz obliczone widma dla różnych pozycji Mn w sieci Si.

Na rys.4 pokazano widmo badanej próbki wraz ze zmierzonymi widmami tlenków manganu oraz metalicznego manganu. Porównanie tych krzywych pozwoliło na wykluczenie obecności

wytrażeń tych związków w implantowanej próbce, co jest bardzo istotnym wnioskiem. W celu określenia w jaki sposób Mn wbudowuje się w matrycę krzemową obliczono modelowe widma dla Mn w różnych położeniach w sieci krystalicznej Si (Rys. 5).

- * Mn_{Si} - Mn ulokowany w pozycji podstawieniowej w matrycy krzemowej,
- * Mn int. - Mn ulokowany w pozycji międzywęzłowej w matrycy krzemowej,
- * MnSi - krystaliczny MnSi.

Porównanie obliczonych widm XANES dla poszczególnych modeli z widmem eksperymentalnym pozwala na wykluczenie wbudowywania się Mn w sieć krystaliczną krzemu w pozycji podstawieniowej oraz w pozycji międzywęzłowej. Porównanie widma zmierzonego z obliczonym widmem dla struktury o uporządkowaniu takim jak w MnSi wskazuje, że struktura wokół implantowanych jonów Mn przypomina strukturę MnSi.

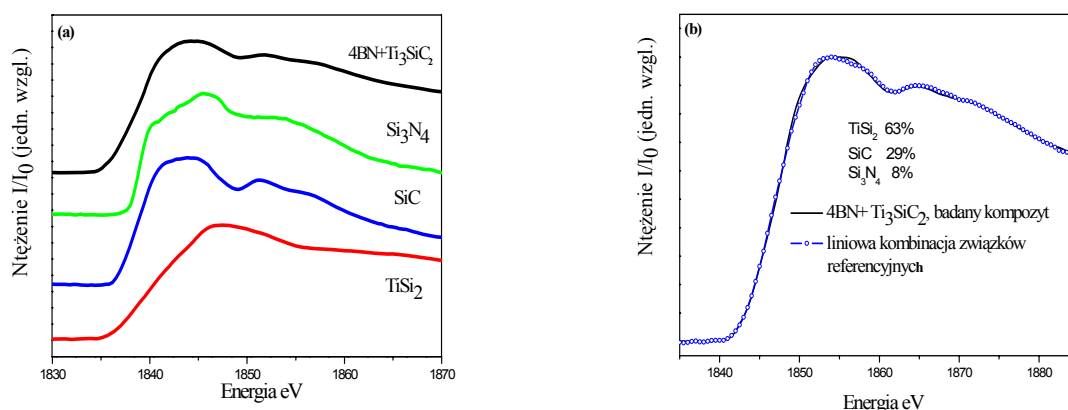
Materiały kompozytowe i inne materiały wielofazowe [15- 20]

W wielu technologiach przemysłowych stosuje się kompozyty lub materiały wielofazowe. Poszukiwano więc niestandardowych metod umożliwiających identyfikację faz wiążących tworzących się podczas procesu technologicznego w kompozytach oraz w innych materiałach złożonych takich jak na przykład ilmenity stosowane do produkcji bieli tytanowej. Wyniki prowadzonych badań wykazano, że rentgenowska spektroskopia absorpcyjna i fotoelektronowa jest techniką umożliwiającą jednoznaczną, ilościową analizę fazową złożonych materiałów.

Przeanalizowano kompozyty na bazie kubicznego azotku boru z dodatkiem takich ceramiek jak: Ti₃SiC₂, TiC i TiN. Dodanie ceramiki do c-BN powoduje, że materiał nadal pozostaje twardy przy jednoczesnym zmniejszeniu jego kruchości. Kompozyty te powstawały w różnych warunkach technologicznych.

Do analizy kompozytów tytanowych zastosowano kilka metod eksperymentalnych. Podstawową metodą była absorpcyjna spektroskopia rentgenowska (XAS). Posłużono się zarówno techniką EXAFS [15] jak i techniką XANES [17,18]. Po raz pierwszy zastosowano metodę podstawowych składników (principal components analysis) do analizy widm XANES kompozytów. Znając fazy, które mogą się tworzyć w procesie technologicznym oraz widma XANES tych faz, stosując ich liniową kombinację wyznaczono procentowy udział faz w mierzonym widmie [17,18]. Dodatkową metodą spektroskopową użytą do analizy kompozytów tytanowych była spektroskopia fotoelektronów (XPS). Połączenie metody XANES i XPS okazało się bardzo użyteczne w przypadku badania składu fazowego związków wielofazowych [16,17]. Pozwoliło, bowiem uzyskać informację o rozłożeniu faz wokół ziaren BN w kompozycie. Obie metody są nieniszczące i mogą być stosowana do materiałów amorficznych. Przykłady analizy widm K Si w badanych kompozytach pokazano na rys. 6.

Z ilościowej analizy dyfraktogramów badanych kompozytów bardzo trudno jest uzyskać poprawny model składu fazowego. Zastosowana metoda Rietvelda zakłada, że powstające fazy nie są zdefektowane i są rozłożone jednorodnie. Warunek ten nie jest spełniony w kompozytach. Ponadto, do uzyskania poprawnego rozkładu natężenia pików w dyfraktogramie wymagane jest jednorodne rozłożenie krystalitów w materiale. Przygotowanie takiej próbki jest utrudnione dużą twardością kompozytów tytanowych. **Metody spektroskopowe okazały się dobrym narzędziem do analizy składu fazowego materiałów wielofazowych.**



Rys. 6 a) Krawędź absorpcji Si zarejestrowana dla faz referencyjnych: TiSi_2 , SiC , Si_3N_4 oraz dla badanego kompozytu $4\text{BN} + \text{Ti}_3\text{SiC}_2$; b) wynik liniowej kombinacji faz referencyjnych (niebieskie kółka) w porównaniu z eksperymentem (czarna linia ciągła).

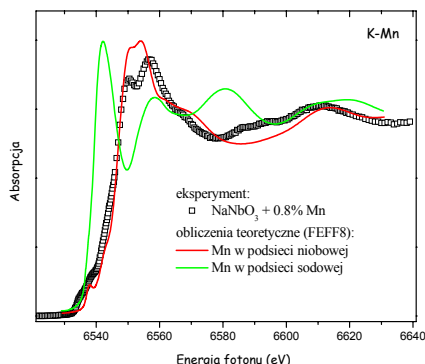
- [1] “X-ray absorption studies of phases formation in Ti/TiN coating on cubic boron nitride“, E. Piskorska, K. Lawniczak-Jablonska, I. N. Demchenko, E. Benko, and E. Welter, *J. Alloy and Compounds*, 362(1-2), 171-177, 2004.
- [2] “Phase and Element Contents of the cBN Based Composites as Estimated by XPS“, E. Piskorska, K. Lawniczak-Jablonska, I. N. Demchenko, E. Benko, M. Heinonen, *Microchemi. Acta* 145, 159-163, 2004.
- [3] “Characterization of the c-BN/ TiC , Ti_3SiC_2 systems by element selective spectroscopy“, E. Piskorska, K. Lawniczak-Jablonska, E. Benko, I. N. Demchenko, P. Klimczyk, R. Minikayev, A. Witkowska, E. Welter, M. Heinonen, *Journal of Alloys and Compounds*, 382, 187-194 (2004).
- [4] “Cubic boron nitride -Ti/TiN composites: hardness and chemical equilibrium as function of temperature“, P. Klimczyk, E. Benko, K. Lawniczak-Jablonska, E. Piskorska, M. Heinonen, A. Ormaniec, W. Gorczyńska-Zawiślan V. S. Urbanovich, *Journal of Alloys and Compounds*, 382, 195-205 (2004).

Niobian sodu (NaNbO_3) wzbudził duże zainteresowanie, ponieważ może być użyty jako związek bazowy do tworzenia roztworów stałych, których własności elektryczne i mechaniczne predestynują je do zastosowań np. w wysokotemperaturowych urządzeniach piezoelektrycznych czy też jako przetworniki akustyczne działające w zakresie mikrofalowym.

Niobian sodu może, w zależności od temperatury, występować w siedmiu stabilnych fazach. Charakteryzują się one różną strukturą i różnymi własnościami. Czynniki takie jak indukowane zewnętrzne pole elektryczne, zmiany ciśnienia lub wprowadzenie domieszki (np. K, Ag, Ba, Ta, Mn) mogą zmieniać naprężenia wewnętrzne lub pola elektryczne i w ten sposób zaburzać stabilność faz. W rezultacie może nastąpić przesunięcie temperatury przejść fazowych, a nawet może pojawić się nowa faza. Oznacza to, że poprzez domieszkowanie można sterować własnościami tych związków.

W przeprowadzonych badaniach skoncentrowano się na niobianie sodu domieszkowanym atomami manganu. Mn może przyjmować różną wartościowość czyli może się wbudowywać zarówno w podsić sodową jak i niobową. Badania metodą EPR wskazały, że jony Mn^{2+} wbudowują się w miejsce jonów Na^{1+} . Natomiast badania metodą XPS wskazały, że jony Mn wbudowują się w miejsce jonów Nb^{5+} . W celu ostatecznego rozstrzygnięcia tej niejednoznaczności wynikającej z różnych badań zmierzono widmo XANES Mn w badanych próbkach. Widma zostały następnie porównane z widmami obliczonymi za pomocą programu FEFF8. Rys. 7 przedstawia przykładowe widmo niobianu sodu z 0.8% domieszką atomów manganu oraz widma teoretyczne. Oba widma zostały obliczone dla tej samej struktury NaNbO_3 ,

ale w jednym przypadku atom manganu został umieszczony w miejscu atomu niobu, a w drugim przypadku - w miejscu atomu sodu. Uzyskane w ten sposób widma w wyraźny sposób różnią się. Porównanie ich z widmem eksperymentalnym pozwala stwierdzić, że atomy manganu w badanych próbkach lokują się w podsiłci niobowej.



Rys. 7 Przykład modelowania pozycji domieszki w badanej strukturze za pomocą techniki XANES

[1] "XANES Mn K edge in NaNbO_3 based ceramics doped with Mn and Bi ions" A. Wolska, A. Molak, K. Lawniczak-Jablonska, J. Kachniarz, E. Piskorska, I.N. Demchenko, I. Gruszka, D. W. Lindle, *Physica Scripta*, T115, 989-991, 2005.

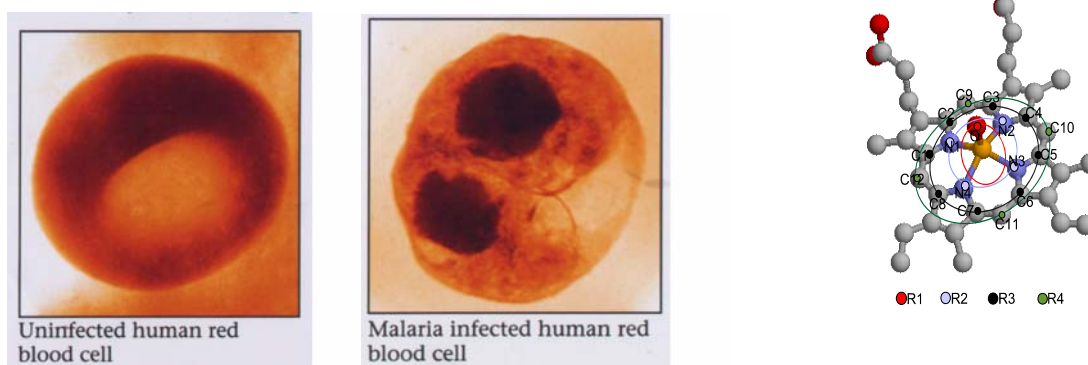
Określono skład fazowy dwóch materiałów służących do produkcji barwników *ilmenitu* i *szlaki tytanowej*. Pierwszy z nich jest naturalną kopaliną wydobywaną w Południowej Norwegii i Australii natomiast drugi jest już produktem po obróbce chemicznej wytwarzanym w Kanadzie. Problem składu fazowego tych materiałów jest bardzo istotny z punktu widzenia ich zastosowania. W procesie zasiarczenia ilmenitu i szlaki otrzymuje się TiO_2 w formie rozpuszczalnej, który następnie służy do produkcji bieli tytanowej. W Polsce produkuje się około 1,5 miliona ton bieli tytanowej rocznie. Znając ilościowy skład fazowy można kontrolować proces technologiczny i starać się go optymalizować. Określenie tego składu nie jest trywialne, ponieważ materiał jest niejednorodny i nie wszystkie fazy są dobrze wykrystalizowane. Zazwyczaj skład kopalin podaje się w przeliczeniu na tlenki, co nie odpowiada zarówno faktycznej zawartości tlenu w materiale jak i faktycznemu stanowi jonowemu pierwiastków, oraz fazom obserwowanym w dyfrakcji. W celu ustalenia składu fazowego zastosowano trzy metody rentgenowskie mianowicie: mikroanalizę (EPMA), dyfrakcję (XRD) oraz absorpcję. Na podstawie uzyskanych wyników udało się zidentyfikować pierwiastki oraz określić rozkład ich zawartość. Następnie zastosowano metodę klasteryzacji, która pogrupowała cząsteczki w kilka klas na podstawie podobieństwa ich składu. W każdej grupie określono skład fazowy zgodny z mierzoną zawartością pierwiastków z uwzględnieniem tlenu. Analiza pojedynczych cząsteczek pozwoliła uzyskać informację na temat faz mniejszościowych takich jak: V_2O_5 , SiO_2 , CaO , Al_2O_3 , których nie obserwowano w dyfrakcji o które stanowią 11% kopaliny. Badania dyfrakcyjne potwierdziły istnienie faz większościowych FeTiO_3 , Fe_2O_3 , MgSiO_3 . Na podstawie wyników absorpcyjnych została potwierdzona jonowość Ti w zidentyfikowanych fazach większościowych, natomiast wiązanie Fe w ilmenicie wydaje się mieć bardziej złożony charakter i wymaga jeszcze dodatkowych badań.

Opracowana metoda wskazuje na możliwość przeprowadzania analizy składu fazowego niejednorodnych materiałów za pomocą metod spektroskopowych nawet wtedy kiedy fazy są mocno zdefektowane lub występują w śladowych ilościach.

[1] Combined XRD, EPMA and X-ray absorption study of mineral ilmenite used in pigments production, M. Klepka, K. Lawniczak-Jablonska, M. Jablonski, A. Wolska, R. Minikayev, W. Paszkowicz, A. Przepiera, Z. Spolnik, R. Van Grieken, *Journal of Alloys and Compounds*, 401, 281-288, 2005.

Materiały biologiczne

Zastosowanie RSA do badań materiałów biologicznych przedstawiono na przykładzie badań związanych z poszukiwaniem nowych leków dla zwalczania malarii. Choroba ta wciąż zbiera obfite żniwa zwłaszcza wśród dzieci w krajach afrykańskich. Wiele szczepów pasożyta malarii uodporniło się na działanie istniejących leków. Poszukuje się więc nowych leków a działanie istniejących nie zostało jeszcze poznane. Pasożyt malarii żywi się białkiem hemoglobiny. Uwolniony jon hemowy jest bardzo szkodliwy zarówno dla nosiciela malarii jak i dla samego pasożyta. Wykształcił on mechanizm obronny polegający na odkładaniu jonów hemowych w strukturę krystaliczną zwaną hemozoiną lub pigmentem malarii. Na rys. 8 pokazano czerwone ciało krwi zdrowe i zaatakowane przez malarię. Jest to obraz uzyskany za pomocą mikroskopii rentgenowskiej na krawędzi K tlenu. Obszary ciemne w zainfekowanej komórce to obszary zawierające hemozoinę.



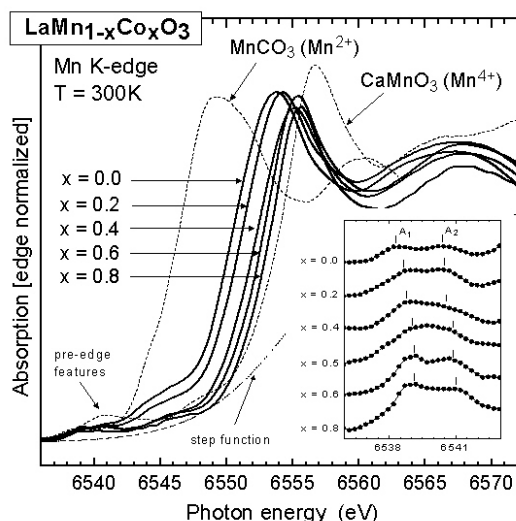
Rys. 8 Z lewej obraz z mikroskopii rentgenowskiej na linii K tlenu (ALS/CXRO Berkeley) nie zainfekowanego czerwonego ciała krwi. W środku ciało zainfekowane z odłożoną hemozoiną. Z prawej model hemozoiny z zaznaczonym wiązaniem Fe-O.

Jak wynika z ostatnich badań krystalograficznych, hemozoina składa się z łańcuchów grup hemowych, powiązanych wiązaniami: Fe – O. Przypuszcza się, że lekarstwa oparte na chininie rozcinały dimery hemowe uwalniając toksyczne jony. Wyodrębnienie hemozoiny jest bardzo kosztowne. Dlatego poszukuje się chemicznych substytutów na których można będzie prowadzić badania podstawowe. β -hematyna właśnie jednym z syntetycznie wytwarzanych substytutów hemozoiny i przypuszcza się, na podstawie pierwszych badań krystalograficznych, że powinna być strukturalnie identyczna. Analiza absorpcyjnych widm EXAFS z powłoki K Fe, pozwoliła na określenie długości wiązań i czynników Debya-Wallera dla struktury wokół atomu żelaza obu wymienionych wyżej związków. Wykazała ona pewne różnice w badanych próbkach, w szczególności w wiązaniach żelazo – tlen pomiędzy grupami hemowymi. Może to sugerować nieregularne występowanie wiązania Fe-O w hemozoinie. Obecnie prowadzone są badania dimerów i monomerów związków hemowych wytwarzanych chemicznie oraz wpływu chininy na te struktury w obecności rozpuszczalnika.

[1] "Local environment of iron in malarial pigment and its substitute β -hematin", M. Walczak, K. Lawniczak-Jablonska, A. Sienkiewicz, I.N. Demchenko, E. Piskorska, G. Chatain and D. S. Bohle, Nuclear Instruments and Methods B 238, 32-38, 2005

Badania peroskitów

Systematyczne badania krawędzi K (XANES) metali przejściowych w serii perowskitów $\text{LaMn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ ($x = 0$ to 1) pozwoliły określić walencyjności Mn i Co w tych związkach [22]. Przesunięcie chemiczne i zmiany struktury w obszarze przed krawędzią widma K (rys. 9) wskazały na stopniowy wzrost średniego stopnia utlenienia jonów zarówno Mn jak i Co ze wzrostem zawartości domieszki Co. Sugeruje to istnienie mieszanej walencyjności $\text{Co}^{2+}/\text{Co}^{3+}$ i $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$ w całym zakresie rozpuszczalności domieszek. Porównanie widm domieszkowanych związków z ważoną sumą widm referencyjnych wykazało, że jony z mieszaną walencyjnością tworzą dwa niezależne przewodzące podsystemy ($\text{Co}^{2+}/\text{Co}^{3+}$ i $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$).



Rys. 9 Znormalizowane widma XANES krawędzi K Mn serii $\text{LaMn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ oraz widma referencyjne MnCO_3 , LaMnO_3 i CaMnO_3 . W ramce pokazano obszar przed krawędzią po odjęciu tła krawędzi i ewolucje maksimów A_1 i A_2

[1] "X-ray absorption near-edge spectroscopy study of Mn and Co valence states in $\text{LaMn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ ($x=0-1$)", M. Sikora, Cz. Kapusta, K. Knížek, Z. Jiráček, C. Autret, M. Borowiec, C. J. Oates, V. Procházka, D. Rybicki, D. Zajac, PRB (2006), **73** 094426.

5.3.2 Linia U1: Rentgenowskie badania dyfrakcyjne

Synchrotronowa linia pomiarowa dla rentgenowskich badań metodami dyfrakcji proszkowej i reflektometrii oraz rozpraszania niskokątowego

Źródło: undulator		Zakres energii fotonów:	5 – 30 keV
Koordinator: Wojciech Paszkowicz (Instytut Fizyki PAN)			

Budowa nowoczesnej linii synchrotronowej przeznaczonej do badań materiałów polikrystalicznych wydaje się ze wszech miar uzasadnioną. Kombinacja wysokiej rozdzielczości kątowej z nieosiągalnymi inną drogą wysokimi natężeniami (bardzo krótki czas pomiaru), oraz kontrolowane warunki pomiaru takie jak ciśnienie, temperatura i środowisko reakcyjne, umożliwi przeprowadzanie szczegółowej analizy strukturalnej złożonych materiałów. Pomiaru tego typu okazują się kluczowe dla badań podstawowych z fizyki, chemii, ochrony środowiska i farmacji, jak też w badaniach materiałów istotnych dla przemysłu i technologii. W ostatnich latach dyfrakcja proszkowa dostarczyła ważnych informacji strukturalnych dotyczących wielu strategicznych materiałów takich jak: nadprzewodniki wysokotemperaturowe, fullereny, tlenki, materiały mezoporowate czy nanostruktury samoporządkujące się. Zagadnienia rozwiązywane z pomocą synchrotronu wiążą się z gospodarką kraju i rozwojem technologii - wystarczy wspomnieć tematy takie jak medycyna i farmacja, magazynowanie energii, kataliza w procesach technologicznych, optoelektronika i zapis informacji, biologia strukturalna, magazynowanie odpadów, w tym niebezpiecznych i radioaktywnych.

Dyfrakcja rentgenowska jest podstawową metodą analizy strukturalnej i defektowej materiałów krystalicznych. Należy w niej wyróżnić następujące główne działy:

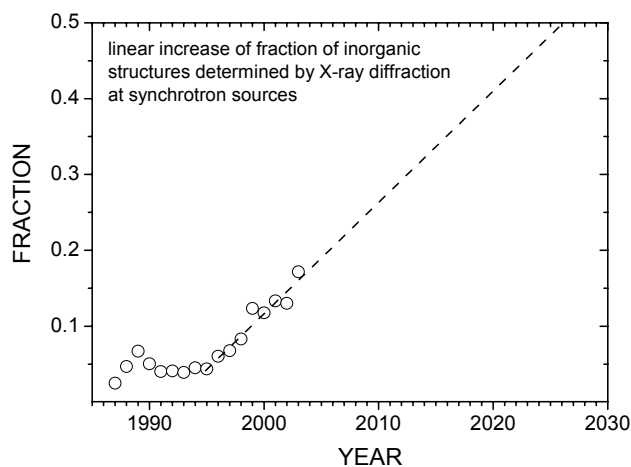
- i) Analiza fazowa i strukturalna materiałów polikrystalicznych
- ii) Analiza strukturalna monokryształów
- iii) Analiza defektów w monokryształach i cienkich warstwach
 - a) dyfraktometria wysokorozdzielcza
 - b) topografia rentgenowska
- iv) Jako osobny punkt należy wymienić metody rozpraszania, które wykorzystują aparaturę przeznaczoną do badań proszkowych:
 - a) reflektometria rentgenowska
 - b) rozpraszanie niskokątowe.

Projekt linii obejmuje potrzeby badawcze w zakresie punktów I, i IV oraz częściowo IIIa, a ponadto opisane niżej potrzeby w zakresie rozpraszania nisko-kątowego i materiałoznawstwa.

Pomiary synchrotronowe

Ze względu na znaczne zróżnicowanie potrzeb wymienionych działów, a nawet wewnątrz nich, synchrotrony współczesne posiadają po kilka pomiarowych linii dyfrakcyjnych, jak również linie pomiarowe, na których można wykonywać nie tylko pomiary dyfrakcyjne (np. pomiary absorpcji). Udział danych, uzyskanych w badaniach strukturalnych materiałów polikrystalicznych z wykorzystaniem linii synchrotronowych dynamicznie rośnie (zob. rysunek poniżej), co wskazuje na słuszność budowy tego typu linii również w Polsce. Warto wspomnieć,

jako ważny przykład, że rozwój badań strukturalnych materiałów biologicznych bez synchrotronu by nie zaistniał.



Udział struktur nieorganicznych w bazie ICSD określonych dla polikryształów z pomocą danych synchrotronowych [8].

Badania dyfrakcyjne materiałów polikrystalicznych w Polsce

Dyfrakcja promieni rentgenowskich na materiałach polikrystalicznych jest najprostszą i najbardziej uniwersalną metodą badań struktury krystalicznej, rozkładu wielkości krystalitów bądź efektów mikrokrystalicznych w tego typu materiałach. W nowoczesnych badaniach korzysta się z promieniowania synchrotronowego, którego parametry pozwalają na uzyskiwanie informacji niedostępnych przy użyciu standardowych przyrządów laboratoryjnych. Różnorodność możliwych konfiguracji stawia dyfrakcyjne linie synchrotronowe przeznaczone do badania materiałów polikrystalicznych w czołówce urządzeń używanych w materiałoznawstwie. Szerokie możliwości badawcze linii pomiarowej przeznaczonej dla badań polikryształów przedstawiono np. w [1].

W kraju istnieje wiele ośrodków zajmujących się dyfrakcją proszkową. Nowoczesna aparatura pomiarowa, wyprodukowana przez wyspecjalizowane firmy w okresie ostatnich kilku czy kilkunastu lat, jest dostępna na prawie każdej wyższej uczelni i w ośrodkach przemysłowych. Zakres badań obejmuje problemów takie jak:

- przejścia fazowe w temperaturze i ciśnieniu, ściśliwość i rozszerzalność termiczna (np. Wydział Chemii UAM w Poznaniu, INTiBS we Wrocławiu, CBW PAN, IChF PAN i IF PAN w Warszawie, Wydz. Fizyki Uniwersytetu Śląskiego), Instytut Chemii UJ, kilka wydziałów AGH
- problemy katalizy, badania chemiczne w środowisku tlenu, wodoru, azotu i innych gazów (IChF PAN w Warszawie, Instytut Chemii UJ).
- badania materiałowe (liczne ośrodki uczelniane i przemysłowe).

W większości ośrodków wyżej wymienionych z nazwy prowadzi się od lat proszkowe pomiary dyfrakcyjne z wykorzystaniem zagranicznych wiązek synchrotronowych, głównie w Hasylab i w ESRF. Zaplecze badawcze i wysoce wykwalifikowana kadra naukowa tych ośrodków umożliwiają rozwiązywanie aktualnych problemów badawczych i technologicznych. Pomiary synchrotronowe, dzięki swym nieosiągalnym w inny sposób parametrom, coraz częściej przyczyniają się do zdecydowanych sukcesów badawczych polskich zespołów.

W Polsce kilka ośrodków prowadzi badania reflektometryczne. Reflektometria rentgenowska umożliwia charakteryzację cienkich warstw i układów warstwowych. Istotą metody jest pomiar natężenia odbitego w funkcji kąta, w jak najszerszym zakresie kątowym (zakres od zera do kilkukilkunastu stopni). Zakres natężeń, jaki można zbadać w laboratorium klasycznym to przeciętnie 6-7 rzędów wielkości, a w laboratorium synchrotronowym - kilkanaście rzędów wielkości. Różnica ta oznacza jakościowy skok w charakteryzacji układów warstwowych, gdzie informacja o grubościach, chropowatościach i gęstościach elementów układu ma fundamentalne znaczenie dla technologii cienkich warstw i heterostruktur. Układy pomiarowe dyfrakcyjne mogą być stosowane do pomiarów reflektometrycznych o ile zapewniają (co zwykle jest spełnione) precyzyjne układy goniometryczne i precyzyjne układy szczelin, lub układy liczników punktowych z analizatorami.

Charakterystyka potrzeb w dziedzinie dyfrakcji proskowej: Zastosowanie promieniowania synchrotronowego w badaniach materiałów polimerowych

W badaniach polimerów wykorzystywane są głównie dyfrakcyjne metody rentgenowskie WAXS (Wide Angle X-Ray Scattering) i SAXS (Small Angle X-Ray Scattering). Metody te należą do najważniejszych źródeł wiedzy o strukturze wewnętrznej polimerów, dlatego też powstanie techniki synchrotronowej w olbrzymim stopniu rozszerzyło nasze możliwości badawcze w odniesieniu do tych materiałów i stało się potężnym impulsem rozwojowym dla fizyki i chemii polimerów jak też nauk technicznych zajmujących się produkcją i przetwórstwem polimerów. Podobna sytuacja dotyczy badań struktur biopolimerów jakimi są białka i kwasy nukleinowe w roztworach. Technika SAXS w odniesieniu do układów biologicznych pozwala nie tylko na zbadanie podstawowych parametrów strukturalnych takich jak np. promień żyrcji czy maksymalny rozmiar cząsteczki, ale obecnie dzięki tej technice możliwe jest nawet weryfikowanie struktur krystalicznych. Należy bowiem pamiętać, że często warunki w których dane białko zostało wykrystalizowane mogą znacznie odbiegać od optimum fizjologicznego. Dlatego potrzebna jest też niezależna metoda pozwalająca na weryfikację konformacji białka obserwowanej w roztworze w stosunku do struktury w kryształach. W przypadku białek wielodomenowych czy dużych multimerycznych kompleksów trudno jest uzyskać ich kryształy i zbadać takie cząsteczki klasycznymi metodami dyfrakcyjnymi. W tym przypadku metoda SAXS pozwala na rekonstrukcję kształtu cząstek i aranżacji domen lub podjednostek w multimerze.

W aspekcie eksperymentalnym należy podkreślić, że przy użyciu tradycyjnej lampy rentgenowskiej i licznika pozycyjnego czas rejestracji pojedynczego dyfraktogramu wynosi od 20 do 30 min (polimery, układy porowate), to przy użyciu promieniowania synchrotronowego może on być zredukowany do setnych części sekundy a więc 10 000 razy mniej. W przypadku białek praktycznie nie jest możliwa rejestracja danych SAXS przy użyciu klasycznych układów bazujących na lampach rentgenowskich (nawet z wirującą anodą). Pojedynczy pomiar trwać może nawet dziesiątki godzin!

Stosując promieniowanie synchrotronowe do analizy przemian fazowych w polimerach, można śledzić niejako na bieżąco zmiany struktury krystalicznej polimerów w trakcie procesów krystalizacji i topnienia, dobierając odpowiednio do potrzeb eksperymentu warunki przebiegu procesów a więc temperaturę, ciśnienie, naprężenia przyłożone do preparatu i inne parametry. Aby odtworzyć przemysłowe warunki przetwórstwa polimerów, w niektórych stacjach badawczych synchrotronów, na linii wiązki promieniowania montowana jest odpowiednio przystosowana aparatura. Jako przykład mogą służyć rentgenowskie badania w czasie rzeczywistym procesu zestalania się włókien polimerowych w trakcie ich wytłaczania ze stopu z ekstrudera. Bada się wpływ szybkości odbioru, stopnia rozciągu, temperatury i innych warunków na kształtowanie się orientacji i struktury krystalicznej we włóknach. Doskonała rozdzielczość

czasowa takich badań - rzędu setnych części sekundy jest szczególnie istotna ze względu na nieizotermiczność przemysłowego procesu wytwarzania włókien jak też innych wyrobów polimerowych.

Technika SAXS znajduje także szerokie zastosowanie w charakterystyce materiałów porowatych czy stopów metali, i materiałów naturalnych takich jak nici pajęczce o szerokich potencjalnych zastosowaniach. Szczególnie badania tych ostatnich mogą nastrożać trudności przy użyciu klasycznych metod z uwagi na silne efekty fluorescencyjne zależne od długości fali oraz silną absorpcję promieniowania. Te efekty można w badaniach synchrotronowych zniwelować.

Reasumując należy więc rozważyć budowę w ramach Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego linii do badań nisko-kątowego rozpraszania promieniowania rentgenowskiego SAXS. Linia ta może współdzielić odcinek prosty z inną linią np. linią do badań dyfrakcji proszkowej.

Charakterystyka potrzeb w dziedzinie dyfrakcji proszkowej.

Dobrymi europejskimi punktami odniesienia dla budowy linii dyfrakcyjnej są w chwili obecnej linie ID31 (ESRF) [1], SNBL(ESRF) [2] i Materials Beamline w SLS (Szwajcaria) [4abc], oraz ID13 (ESRF) dla SAXS. Istnieją też nowoczesne działające linie pomiarowe poza Europą (USA, Japonia). Elementy nowoczesnych rozwiązań pomiarowych włączają:

- szeroki zakres energii umożliwiający dobór energii (długości fali) do danego zagadnienia; zakres 5-60 keV (dostępny na ID31 w ESRF) jest prawdopodobnie nieosiągalny w obecnym projekcie: sugeruje się dostępność zakresu przynajmniej 5-30 keV ; w badaniach strukturalnych stosuje się dość często zakres 8-20 keV, jednak w ostatnich latach obserwuje się tendencję do zwiększania energii ze względu, m.in., na zjawisko redukcji natężenia wiązki ugiętej w wyniku absorpcji w materiałach zawierających pierwiastkach o dużej liczbie atomowej. Wyższa energia - przynajmniej 30 keV - konieczna jest w badaniach ciśnieniowych i w badaniach dyfrakcyjnych własności materiału w funkcji głębokości.

Wśród celów badawczych postawionych linii U1 jest skrócenie czasu pomiarowego z wielogodzinnego, z rozdzielczością rzędu $0.1^\circ(2\theta)$ (klasyczny dyfraktometr), lub wielominutowego, z rozdzielczością rzędu $0.05^\circ(2\theta)$ (nowoczesny dyfraktometr z licznikiem paskowym), do sekundowego lub jeszcze szybszego z rozdzielczością do $0.003^\circ(2\theta)$. Dzięki szybkości możliwe będą badania in situ różnego rodzaju, badania supermałych obiektów (do mikrogramowych), można będzie wykonywać

- dyfrakcyjne mapy powierzchni kryształów i cienkich warstw (dyfraktogramy w szerokim zakresie kątowym wykonywane w funkcji współrzędnych x i y).
- profile głębokościowych (grazing incidence diffraction) w funkcji kąta, lub co jest istotne lecz jak dotychczas mało rozpowszechnione, w funkcji energii wiązki; zasięg takiego profilu zależy silnie od dostępnej energii. (Ostatnio pokazano, że można wyznaczyć profil głębokościowy betonu nawet do głębokości 40 mm.)

- jak największy strumień fotonów na (małej) próbce; istotne jest zapewnienie stabilnej długości fali i stabilnej pozycji wiązki (monitorowanie tych parametrów w trakcie pomiaru byłoby istotnym ułatwieniem w pracy),

- powyższe dwa wymagania powinny zostać zoptymalizowane poprzez wybór odpowiedniego źródła (wiggler, undulator, insertion device),

- automatyzację zmiany próbek (na przykład na linii ID31 w ESRF zastosowano robota mogącego zmienić 50 próbek kapilarnych. W warunkach, w których czas ręcznej zmiany próbki może być wielokrotnie dłuższy od czasu pomiaru, rozwiązanie to radykalnie poprawia efektywność pracy, przez co wykorzystanie czasu pomiarowego jest istotnie lepsze); robotyzacja może w istotny sposób zmniejszyć koszty obsługi - do niektórych prostszych eksperymentów mogą wystarczyć jedna-dwie osoby, lub nawet możliwe będzie wykonywanie standardowych pomiarów przez załogę danej linii;

- nowoczesne liczniki jednowymiarowe (cylindryczny detektor paskowy w SLS) lub "klasyczne" (tzn. stosowane od dłuższego czasu) dwuwymiarowe liczniki CCD (np. linie ID31, SNBL w ESRF), służące szybkim pomiarom średniej rozdzielczości,

- układy wielu liczników punktowych z analizatorami, służące proszkowym pomiarom wysokorozdzielczym,

- stosuje się wiązkę równoległą lub wiązkę zogniskowaną na próbce; to drugie rozwiązanie może nieco pogorszyć rozdzielczość, pozwalając na istotne zwiększenie strumienia fotonów padających na małą próbkę, wymaga jednocześnie opracowania odpowiedniego układu optycznego pozwalającego zapewnić ogniskowanie dla różnych długości fali i dopasowanie położenia dyfraktometru do aktualnej pozycji ogniska wiązki ("przesuwność" wzdłuż kierunku wiązki). (Informacje o rozdzielczości w funkcji optyki rentgenowskiej: [5] szerokość refleksu na ID31 jest 0.003° , czyli około dwadzieścia razy mniejsza niż dla danych z klasycznego dyfraktometru),

- układy do badań w funkcji ciśnienia (w zakresie wysokich ciśnień) z komorą diamentową, oraz komory temperaturowe, stosuje się również komory próżniowe lub zapewniające atmosferę wybranych gazów.

Dyfrakcja proszkowa jest podstawową metodą badań strukturalnych i analizy fazowej, i z całą pewnością będzie wykorzystywana przez liczne ośrodki krajowe, tak mające doświadczenie w pracy na liniach synchrotronowych jak i takie, które dotychczas w takie prace się nie włączyły. Jest technicznie możliwe poszerzenie zakresu badań opisanej linii o inne badania (np. absorpcja), jednak autorzy uważają że lepsze by było zbudowanie oddzielnej linii absorpcyjnej, ze względu na znaczne potrzeby w dziedzinie dyfrakcji proszkowej, i nieidentyczność wymagań technicznych dotyczących tych dwóch rodzajów badań.

Należy mieć na uwadze fakt, iż umożliwienie badań absorpcji jako opcja dodatkowa umożliwiłoby pełniejszą charakteryzację badanych materiałów. W opinii autorów linia dyfrakcyjna powinna zostać przystosowana również do celów reflektometrii - jedynym, nietrudnym do spełnienia warunkiem jest precyzyjny goniometr (koło Eulera) i precyzyjne układy szczelin (W tym antyrozproszeniowych) na wiązce padającej i ugiętej.

Zakłada się, że linia U1 będzie służyła pomiarom dyfrakcyjnym materiałów polikrystalicznych (proszki, cienkie warstwy) i reflektometrycznym. Parametry linii umożliwią też szybką charakteryzację struktury defektowej monokryształów i warstw z naturalnym ograniczeniem wynikającym z braku idealnie równoległości wiązki rentgenowskiej.

Ze względu na rozwój badań struktury defektowej kryształów i warstw w Polsce (np. Uniwersytet Warszawski, Instytut Fizyki PAN, ITME, ITE, ITE Wrocław) wydaje się właściwe skonstruowanie niezależnej linii dla celów dyfraktometrii wysokorozdzielczej i topografii.

Przykładowy obszar wykorzystania linii U1 w dziedzinie materiałoznawstwa

Aktualny obszar zainteresowań to:

1) Zastosowanie metody XRD w badaniach typu "stress depth profile". W szczególności, badania warstw, od kilku do kilkuset mikrometrów, co oznacza dyfrakcje z użyciem energii kilkudziesięciu kiloelektronowoltów.

Techniki typu Energy Dispersive XRD lub Grazing Incidence XRD umożliwiają profilowanie warstw o grubościach od kilku warstw atomowych do kilkuset mikrometrów. W przypadku cienkich warstw i metody typu *grazing incidence*, rozdzielczość głębokościowa może być na poziomie pojedynczej warstwy atomowej. Nadają się do tego duże synchrotrony i/lub wiązki wyposażone w undulatory. Takich jednostek aktualnie jest bardzo niewiele, w szczególności w Europie.

2) Cienkie warstwy metaliczne i tlenkowe. Zagadnienia dotyczące: - wczesnych faz wzrostu warstw epitaksjalnych, - morfologia i struktura wraz z dopasowaniem epitaksjalnym, - dyfuzja na granicy warstw, - dyfuzja reakcyjna i wzajemna, - procesy adsorpcji gazów w zależności od grubości warstw, struktury i stechiometrii. Procesy te mają możliwości aplikacyjne (kataliza, sensory).

Bibliografia:

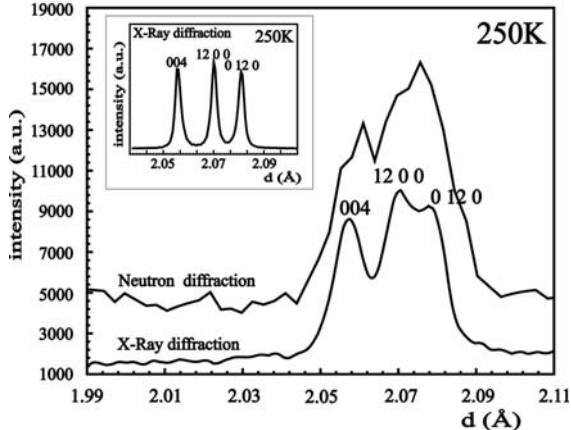
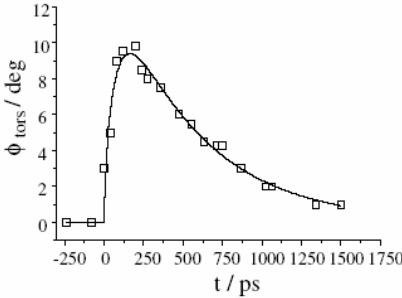
- [1] Fitch, A.N. The high resolution powder diffraction beam line at ESRF, (2004) *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology* 109 (1), pp. 133-142.
- [2] http://www.esrf.fr/exp_facilities/BM1A/index.htm SNBL *The Swiss-Norwegian facility is split into two branch lines:*
- [3] A. Lausi et al, *Synchr. Radiat. Nat. Sci.* 5 (2006) 100
- [4a] First experiments at the Swiss Light Source Materials Science beamline powder diffractometer
Gozzo F, Schmitt B, Bortolamedi T, Giannini C, Guagliardi A, Lange M, Meister D, Maden D, Willmott P, Patterson BD
JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 362 (1-2): 206-217 JAN 14 2004
- [4b] The Materials Science Beamline at the Swiss Light Source: design and realization, Patterson BD, Abela R, Auderset H, Chen Q, Fauth F, Gozzo F, Ingold G, Kuhne H, Lange M, Maden D, Meister D, Pattison P, Schmidt T, Schmitt B, Schulze-Briese C, Shi M, Stampanoni M, Willmott PR, *NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION A-ACCELERATORS SPECTROMETERS DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT* 540 (1): 42-67 MAR 11 2005
- [4c] The materials science beamline at the Swiss Light Source, Patterson BD, Bronnimann C, Maden D, Gozzo F, Groso A, Schmitt B, Stampanoni M, Willmott PR, *NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS* 238 (1-4): 224-228 AUG 2005
- [5] The instrumental resolution function of synchrotron radiation powder diffractometers in the presence of focusing optics, Gozzo F, De Caro L, Giannini C, Guagliardi A, Schmitt B, Prodi A, *JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY* 39: 347-357 Part 3 JUN 2006
- [6] Cerenius Y., Svensson C, *Synchr. Radiat. Nat. Sci.* 5 (2006) 105
- [7] <http://pal.postech.ac.kr/eng/>
- [8] W. Paszkowicz, *Synchr. Radiat. Nat. Sci.* 5 (2006) 115.

Tabela 1. Przykłady proszkowo-dyfrakcyjnych linii pomiarowych i ich parametrów.

LINIA	SYNCHROTRON	ZRÓDŁO	Zakres energii	Strumień fotonów [fotony/s]	Wielkość wiązki	Uruchomiona	Referencje
BM1a	ESRF	BM	6 - 22 (30) keV			~1995	[2, 1]
BM1b	ESRF	BM	5 - 41 keV(mono) lub wiązka biała			~1995	[2, 1]
8c2	Pohang Light Source (Korea)		4~20	~1.0x10 ¹⁰	1 mm(V) x 20 mm(H)	(2000?)	[7]
ID31	ESRF	3 undulatory	5-60			(2002)	[1]
MCX	Elettra	BM	3-23		4mm unfoc 0.3mm focus	2007	[3]
powder/SAXS beamline	MAX-IV	ondulator	5-30		1x0.6mm unfoc 0.19x0.03 mm ² focus	future	[6]
Powder diffraction beamline	Diamond/Oxford	ondulator	5-20		unfoc	future	www

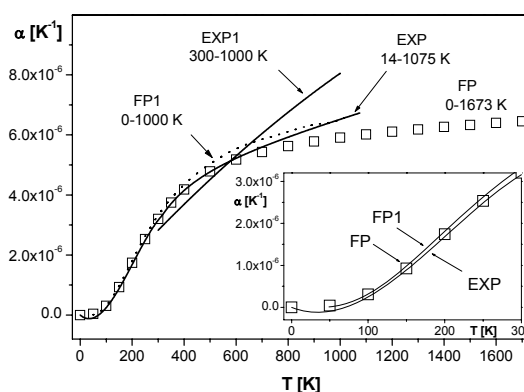
Tabela 2a. Przykłady zastosowań dyfrakcji proszkowej z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego obejmują liczne dziedziny nauki, techniki i inne. Liderami badań są uczeni z ośrodków w USA (np. D.E. Cox) i Japonii (np. M. Takata), jedynych krajów posiadających po kilkanaście działających ringów, czyli które mają powszechną dostępność do linii synchrotronowych. W tabeli podano również przykładowe prace z udziałem polskim (czcionką wytłuszczoną) wykonane w ośrodkach w Hasylab (Niemcy), ESRF (Francja), PLS (Korea), Daresbury (Wielka Brytania). Pod niektórymi odnośnikami zamieszczono ilustrację graficzną wyników.

Nr	zastosowanie	literatura
1.	anizotropia dystorsji biogenicznego aragonitu	Pokroy, B., Quintana, J.P., Caspi, E.N., Berner, A., Zolotoyabko, E. Anisotropic lattice distortions in biogenic aragonite (2004) <i>Nature Materials</i> 3 (12), pp. 900-902.
2.	anomalie w temperaturowych zależnościach rozmiarów komórki elementarnej	Savytskii, D., Vasylechko, L., Senyshyn, A., Matkovskii, A., Bahtz, C., Sanjuan, M.L., Bismayer, U., Berkowski, M. Low-temperature structural and Raman studies on rare-earth gallates (2003) <i>Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics</i> 68 (2), pp. 241011-241018.
3.	badania gęstości ładunków	The large Debye-Scherrer camera installed at SPring-8 BL02B2 for charge density studies Nishibori E, Takata M, Kato K, Sakata M, Kubota Y, Aoyagi S, Kuroiwa Y, Yamakata M, Ikeda N <i>Nuclear Instruments & Methods A</i> 467: 1045-1048 2001
4.	badania struktury spinelowych materiałów na elektrody w ogniwach odwracalnych	Wolska, E., Piszora, P., Darul, J., Nowicki, W. Synchrotron X-ray diffraction studies on the phase transitions in the spinel $\text{Li}_x\text{Mn}_{3-x}\text{O}_4$ intercalation compounds (2004) <i>Journal of Physics and Chemistry of Solids</i> 65 (2-3), pp. 223-227. Piszora P. Temperature dependence of the order and distribution of Mn ³⁺ and Mn ⁴⁺ cations in orthorhombic LiMn ₂ O ₄ <i>Journal of Alloys and Compounds</i> 382 (2004) 112-118.
5.	badania struktury tlenków magnetycznych	E. Wolska, M. Tovar, B. Andrzejewski, W. Nowicki, J. Darul, P. Piszora, M. Knapp Structural and magnetic properties of the iron substituted lithium-manganese spinel oxides (2006) <i>Solid State Science</i> , 8, pp. 31-36.

		 <p style="text-align: center;">Fragmety rentgenogramu i neutronogramu LiMn_2O_4 ilustrujące rozszczepienie spinelowego refleksu 400 w zestawieniu z rezultatem wysokorozdzielczych pomiarów synchrotronowych.</p>
6.	badanie krótkożyłowych stanów wzbudzonych	<p>Picosecond X-Ray Diffraction Probed Transient Structural Changes in Organic Solids S. Techert, F. Schotte, and M. Wulff PHYSICAL REVIEW LETTERS 86, 10 2001</p>  <p style="text-align: center;">Ewolucja czasowa uśrednionego kąta skręcenia. Obserwuje się czas relaksacji $t_{\text{relax}} = 520$ ps [czas życia elektronu w stanie wzbudzonym malekuły w kryształ molekularnym wynosi $t_r = 1.7-1.9$ ns (odsylacze podane w cytowanej pracy).]</p>
7.	badanie procesów odwodornienia	<p>Stahl K, Hanson J Real-time X-ray synchrotron powder diffraction studies of the dehydration processes in scolecite and mesolite (1994) <i>Journal of Applied Crystallography</i> 27 (pt 4), pp. 543-550.</p>
8.	degradacja zanieczyszczonej gleby	<p>Isaure, M.-P., Manceau, A., Geoffroy, N., Laboudigue, A., Tamura, N., Marcus, M.A. Zinc mobility and speciation in soil covered by contaminated dredged sediment using micrometer-scale and bulk-averaging X-ray fluorescence, absorption and diffraction techniques (2005) <i>Geochimica et Cosmochimica Acta</i> 69 (5), pp. 1173-1198.</p>
9.	dyfrakcja poślizgowa z wykorzystaniem anomalnej dyspersji	<p>J. Coraux, M. G. Proietti, V. Favre-Nicolin, H. Renevier, B. Daudin Step-by-step capping and strain state of GaN/AlN quantum dots studied by grazing-incidence diffraction anomalous fine structure <i>Physical Review B</i> 73, 205343 2006</p>
10.	formowanie się uporządkowanych łańcuchów tlenowych w mikroporowatym materiale metaloorganicznym	<p>Kitaura, R., Kitagawa, S., Kubota, Y., Kobayashi, T.C., Kindo, K., Mita, Y., Matsuo, A., (...), Takata, M. Formation of a one-dimensional array of oxygen in a microporous metal-organic solid (2002) <i>Science</i> 298 (5602), pp. 2358-2361</p>
11.	kierunkowe wiązanie wodorowe	<p>Filinchuk, Y.E., Sheptyakov, D., Yvon, K. Directional metal-hydrogen bonding in interstitial hydrides: II. Structural study of HoNi_3D_x ($x = 0, 1.3, 1.8$) (2006) <i>Journal of Alloys and Compounds</i> 413 (1-2), pp. 106-113.</p>
12.	koegzystencja faz w szerokim zakresie temperatur	<p>Przeniosło, R., Van Beek, W., Sosnowska, I. Phase coexistence in annealed $\text{CaMn}_7\text{O}_{12}$ (2003) <i>Solid State Communications</i> 126 (9), pp. 485-488.</p>
13.	konwersja katalizator – nie-katalizator poprzez kombinację dyfrakcji	<p>Couves, J.W., Thomas, J.M., Waller, D., Jones, R.H., Dentt, A.J., Derbyshire, G.E., Greaves, G.N. Tracing the conversion of aurichalcite to a copper catalyst by combined x-ray absorption and diffraction (1991) <i>Nature</i> 354 (6353), pp. 465-468</p>

	synchrotronowej i neutronowej	
14.	kryminologia	Kempson, Ivan M.; Paul Kirkbride, K.; Skinner, William M.; Coumbaros, John Applications of synchrotron radiation in forensic trace evidence analysis Talanta Volume: 67, Issue: 2, August 15, 2005, pp. 286-303
15.	magnetyczne i krystalograficzne nadstruktury w perowskitach	Radaelli, P.G., Cox, D.E., Capogna, L., Cheong, S.-W., Marezio, M. Wigner-crystal and bi-stripe models for the magnetic and crystallographic superstructures of $\text{La}_{0.333}\text{Ca}_{0.667}\text{MnO}_3$ (1999) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics 59 (22), pp. 14440-14450
16.	metody dyfrakcji proszkowej w wysokich ciśnieniach	Paszkwicz, W. High-pressure powder X-ray diffraction at the turn of the century (2002) Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 198 (3-4), pp. 142-182
17.	określanie natury wiązania chemicznego	Kuroiwa, Y., Aoyagi, S., Sawada, A., Harada, J., Nishibori, E., Takata, M., Sakata, M. Evidence for Pb-O covalency in tetragonal PbTiO_3 (2001) Physical Review Letters 87 (21), pp. 2176011-2176014
18.	określanie struktury protein	Von Dreele, R.B., Stephens, P.W., Smith, G.D., Blessing, R.H. The first protein crystal structure determined from high-resolution X-ray powder diffraction data: A variant of T3R3 human insulin-zinc complex produced by grinding (2000) Acta Crystallographica Section D: Biological Crystallography 56 (12), pp. 1549-1553.
19.	określanie złożonych struktur poprzez kombinację dyfrakcji synchrotronowej i neutronowej	Morris, R.E., Harrison, W.T.A., Nicol, J.M., Wilkinson, A.P., Cheetham, A.K. Determination of complex structures by combined neutron and synchrotron X-ray powder diffraction (1992) Nature 359 (6395), pp. 519-522
20.	określanie złożonych struktur wysokociśnieniowych	Schwarz, U., Grzechnik, A., Syassen, K., Loa, I., Hanfland, M. Rubidium-IV: A High Pressure Phase with Complex Crystal Structure (1999) Physical Review Letters 83 (20), pp. 4085-4088 Hanfland, M., Schwarz, U., Syassen, K., Takemura, K. Crystal Structure of the High-Pressure Phase Silicon VI (1999) Physical Review Letters 82 (6), pp. 1197-1200
21.	przejścia fazowe w manganitach	Radaelli, P.G., Cox, D.E., Marezio, M., Cheong, S.-W., Schiffer, P.E., Ramirez, A.P. Simultaneous structural, magnetic, and electronic transitions in $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ with $x = 0.25$ and 0.50 (1995) Physical Review Letters 75 (24), pp. 4488-4491.
22.	przejścia fazowe w perowskitach	Noheda, B., Gonzalo, J.A., Cross, L.E., Guo, R., Park, S.-E., Cox, D.E., Shirane, G. Tetragonal-to-monoclinic phase transition in a ferroelectric perovskite: The structure of $\text{PbZr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48}\text{O}_3$ (2000) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics 61 (13), pp. 8687-8695 Yashima, M. In situ observations of phase transition using high-temperature neutron and synchrotron x-ray powder diffractometry (2002) Journal of the American Ceramic Society 85 (12), pp. 2925-2930.
23.	przewodnictwo molekularne	Yamamoto, K., Fujiwara, E., Kobayashi, A., Fujishiro, Y., Nishibori, E., Sakata, M., Takata, M., (...), Kobayashi, H. Single-component molecular conductor $[\text{Zn}(\text{tmdt})_2]$ and related Zn complexes (2005) Chemistry Letters 34 (8), pp. 1090-1091.
24.	rozszerzalność termiczna materiałów azotkowych	Paszkwicz, W., Pelka, J.B., Knapp, M., Szyszko, T., Podsiadlo, S. Lattice parameters and anisotropic thermal expansion of hexagonal boron nitride in the 10-297.5 K temperature range, (2002) Applied Physics A: Materials Science and Processing 75 (3), pp. 431-43

Paszkowicz W, Minikayev R, Piszora P, Knapp M, Bahtz C, Recio JM, Marques M, Mori-Sanchez P, Gerward L, Jiang JZ, Thermal expansion of spinel-type Si₃N₄, PHYSICAL REVIEW B 69 (5): art. no. 052103 2004

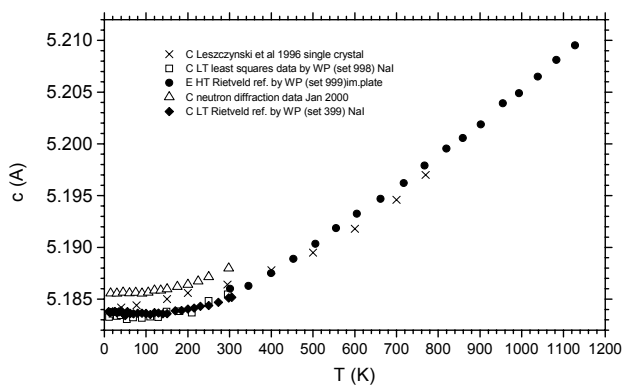


Współczynnik rozszerzalności liniowej dla γ -Si₃N₄ w funkcji temperatury. Wstawka pokazuje powiększoną część niskotemperaturową odpowiadającą zakresowi eksperymentalnemu pomiarowemu pracy. Dane doświadczalne dla 14-1075 K ("EXP", linia ciągła) oparto na dopasowanej zależności $\alpha(T)$; dane literaturowe 300-1000 K oznaczono ("EXP1", linia ciągła). Pokazano też obliczenia z pierwszych zasad ("FP", \square) dla 0 - 1673 K, oraz wcześniejsze obliczenia z literatury ("FP1").

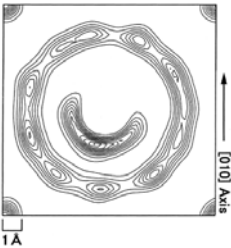
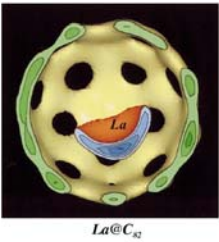
Rietveld refinement for indium nitride in the 105-295 K range
Paszkowicz W, Cerny R, Krukowski S
POWDER DIFFRACTION 18 (2): 114-121 JUN 2003

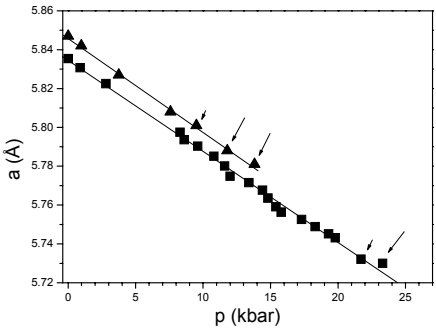
Paszkowicz W, Domagała JZ, Sokołowski J.A, Kamler G., Podsiadło S., Knapp M.
Thermal expansion of GaN in the temperature range 11 K - 296 K

Synchrotron Radiation Studies of Materials, eds.: M. Lefeld-Sosnowska, J. Gronkowski, (Instytut Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Warszawskiego, Warszawa, 1999), pp. 183-189. ISBN 83-913171-0-2



		<p style="text-align: center;">Eksperymentalna zależność stałych sieci GaN, a i c, od temperatury dla polikrystalicznego GaN (♦●□), 11-1123 K. Dla porównania pokazano literaturowe dane dla monokryształów (×) oraz dane z dyfrakcji neutronów dla polikrystalicznego GaN (△).</p>
25.	roztwór stały jako ferroelektryk	<p>Noheda, B., Cox, D.E., Shirane, G., Gonzalo, J.A., Cross, L.E., Park, S.-E.</p> <p>A monoclinic ferroelectric phase in the $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ solid solution</p> <p>(1999) Applied Physics Letters 74 (14), pp. 2059-2061</p>
26.	rozwiązanie struktury na podstawie danych zebranych w ciągu sekund dla mikrogramowej próbki	<p>Bhunavesh NSP, Reibenspies JH, Zhang Y, Lee PL, A novel strategy for ab initio structure determination using micro-powder X-ray diffraction: Structure solution and refinement of 3-bromophenylboronic acid and tris(4-bromophenyl)boroxine</p> <p>(2005) Journal of Applied Crystallography 38 (4), pp. 632-638. C</p>
27.	rozwiązywanie struktury z wykorzystaniem metod ab initio	<p>A. Littner, M. Francois, J. Tobola, E. Elkaim, B. Malaman, M. Vilasi</p> <p>Ab-initio crystal structure of $\text{Mo}_4+x\text{Ru}_9-x\text{Si}_5$ ($0 < x < 1$) by synchrotron powder diffraction and electronic properties calculation (KKR method)</p> <p>Intermetallics 13 (2005) 1048–1055</p>
28.	stany spinowe w perowskitach	<p>Fauth, F., Suard, E., Caignaert, V.</p> <p>Intermediate spin state of Co^{3+} and Co^{4+} ions in $\text{La}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{CoO}_3$ evidenced by Jahn-Teller distortions</p> <p>(2002) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics 65 (6), pp. 604011-604014</p>
29.	struktura i przejścia fazowe w fullerenach i pochodnych	<p>Takata, M., Umeda, B., Nishibori, E., Sakata, M., Saito, Y., Ohno, M., Shinohara, H.</p> <p>Confirmation by X-ray diffraction of the endohedral nature of the metallofullerene $\text{Y}@C_{82}$</p> <p>(1995) Nature 377 (6544), pp. 46-49.</p> <p>Nishibori, E., Takata, M., Sakata, M., Inakuma, M., Shinohara, H.</p> <p>Determination of the cage structure of $\text{Sc}@C_{82}$ by synchrotron powder diffraction</p> <p>(1998) Chemical Physics Letters 298 (1-3), pp. 79-84</p> <p>Heiney, P.A., Fischer, J.E., McGhie, A.R., Romanow, W.J., Denenstein, A.M., McCauley Jr., J.P., Smith III, A.B., Cox, D.E.</p> <p>Orientational ordering transition in solid C_{60}</p> <p>Physical Review Letters 66, 2911-2914 (1991).</p> <p>Takata, M., Nishibori, E., Umeda, B., Sakata, M., Yamamoto, E., Shinohara, H.</p> <p>Structure of endohedral dimetallofullerene $\text{Sc}_2@C_{84}$</p> <p>(1997) Physical Review Letters 78 (17), pp. 3330-3333</p> <p>Nishibori, E., Takata, M., Sakata, M., Tanaka, H., Hasegawa, M., Shinohara, H.</p> <p>Giant motion of La atom inside C_{82} cage</p> <p>(2000) Chemical Physics Letters 330 (5-6), pp. 497-502.</p> <p>Z tej pracy pochodzą poniższe rysunki</p>

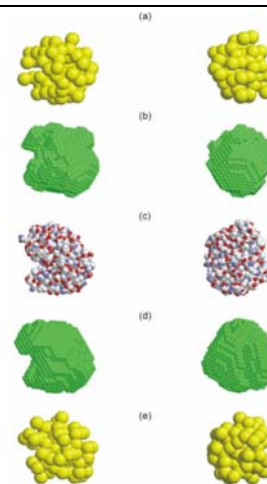
		 <p>Gęstości ładunku dla La@C82, płaszczyzna (1 0 0). Kontury w zakresie 0.0 do 4.5xe A³ z krokiem 0.3xe[A³].</p>  <p>Przekrój powierzchni stałej gęstości ładunku dla molekuly La@C82. Poziom gęstości 1.8 xe[A³].</p> <p>Takata, M., Nishibori, E., Sakata, M., Wang, C.-R., Shinohara, H. Sc2 dimer in IPR-violated C66 fullerene: A covalent bonded metallofullerene (2003) <i>Chemical Physics Letters</i> 372 (3-4), pp. 512-518.</p>
30.	struktura kości	Miller, L.M., Vairavamurthy, V., Chance, M.R., Mendelsohn, R., Paschalis, E.P., Betts, F., Boskey, A.L. In situ analysis of mineral content and crystallinity in bone using infrared micro-spectroscopy of the ν4 PO4 ³⁻ vibration (2001) <i>Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects</i> 1527 (1-2), pp. 11-19
31.	struktura materiałów mikroporowatych	Afeworki, M., Dorset, D.L., Kennedy, G.J., Strohmaier, K.G. Synthesis and characterization of a new microporous material. 1. Structure of aluminophosphate EMM-3 (2006) <i>Chemistry of Materials</i> 18 (6), pp. 1697-1704.
32.	struktura minerałów	Chiari, G., Giustetto, R., Ricchiardi, G. Crystal structure refinements of palygorskite and Maya Blue from molecular modelling and powder synchrotron diffraction (2003) <i>European Journal of Mineralogy</i> 15 (1), pp. 21-33. Groat L.A., S. Kek, U. Bismayer, C. Schmidt, H.G. Krane, H. Meyer, L. Nistor, G. van Tendeloo, A synchrotron radiation, HRTEM, X-ray powder diffraction, and Raman spectroscopic study of malayaite, CaSnSiO ₅ , <i>American Mineralogist</i> , June 1996; v. 81; no. 5-6; p. 595-602
33.	struktura nanokrystalicznych kompozytów	Gierlotka S, B. Palosz, A. Swiderska-Sroda, E. Grzanka, G. Kalisz, K. Fietkiewicz, S. Stelmakh, Ch. Lathe Synthesis of Metal-Ceramic Nanocomposites by High-Pressure Infiltration Solid State Phenomena, 102, 157-164 (2004)
34.	struktura pigmentu malarii I produktów detoksykacji hemu	Pagola, S., Stephens, P.W., Bohle, D.S., Kosar, A.D., Madsen, S.K. The structure of malaria pigment β-haematin (2000) <i>Nature</i> 404 (6775), pp. 307-310 Bohle, D.S., Dinnebier, R.E., Madsen, S.K., Stephens, P.W. Characterization of the products of the heme detoxification pathway in malarial late trophozoites by X-ray diffraction (1997) <i>Journal of Biological Chemistry</i> 272 (2), pp. 713-716
35.	struktura spinelowego azotku krzemu	Jiang, J.Z., Stähl, K., Berg, R.W., Frost, D.J., Zhou, T.J., Shi, P.X. Structural characterization of cubic silicon nitride (2000) <i>Europhysics Letters</i> 51 (1), pp. 62-67.
36.	struktura zmineralizowanego drewna	Kuczumow, A., Vekemans, B., Schalm, O., Dorriné, W., Chevallier, P., Dillmann, P., Ro, C.-U., (...), Van Grieken, R. Analyses of petrified wood by electron, X-ray and optical microprobes (1999) Journal of analytical atomic spectrometry 14 (3), pp. 435-446.
37.	strukturalna stabilność ZnO	Jiang, J.Z., Olsen, J.S., Gerward, L., Frost, D., Rubie, D., Peyronneau, J. Structural stability in nanocrystalline ZnO (2000) <i>Europhysics Letters</i> 50 (1), pp. 48-53.

38.	ściśliwość i przejścia fazowe w materiałach półprzewodnikowych	<p>Paszkowicz W, Dynowska E High pressure high temperature diffraction study of MnTe using synchrotron radiation ACTA PHYSICA POLONICA A 91 (5): 939-944 1997</p> <p>Paszkowicz W, Szuszkiewicz W, Dynowska E., Domagala J.Z., Truckenbrodt J., Skierbiszewski C. High-pressure study of Hg_{1-x}TM_xS (TM = Mn, Fe, Co) Synchrotron Radiation Studies of Materials, eds.: M. Lefeld-Sosnowska, J. Gronkowski, (Instytut Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Warszawskiego, Warszawa, 1999), pp. 191-198. ISBN 83-913171-0-2</p> <p>Domagala J, Witkowska B, Marczak M, Zinn P, High-pressure-high-temperature study of Hg_{1-x}Mn_xS, Paszkowicz W, Szuszkiewicz W, Dynowska E, JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 286 (1-2): 208-212 MAY 5 1999</p>  <p>Zmiany stałych sieci dla β-Hg_{0.98}Mn_{0.02}S (x=0.02, ▲) i β-Hg_{0.93}Mn_{0.07}S (x=0.07, ■) z ciśnieniem. Krótkie i długie strzałki wskazują punkty dla których, w następstwie przejścia fazowego, w widmie zaznacza się obecność odpowiednio niewielkiej i znaczącej ilości fazy α.</p>
39.	uniwersalny diagram fazowy dla piezoelektrycznych perowskitów	<p>Cox, D.E., Noheda, B., Shirane, G., Uesu, Y., Fujishiro, K., Yamada, Y. Universal phase diagram for high-piezoelectric perovskite systems (2001) Applied Physics Letters 79 (3), pp. 400-402</p>
40.	uporządkowanie ładunków w magnetycie	<p>Wright, J.P., Attfield, J.P., Radaelli, P.G. Charge ordered structure of magnetite Fe₃O₄ below the Verwey transition (2002) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics 66 (21), pp. 2144221-21442215</p>
41.	uporządkowanie magnetyczne w perowskitach	<p>Woodward, P.M., Cox, D.E., Moshopoulou, E., Sleight, A.W., Morimoto, S. Structural studies of charge disproportionation and magnetic order in CaFeO₃ (2000) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics 62 (2), pp. 844-855.</p>
42.	uporządkowanie w nanokryształach peptydów	<p>Diaz-Avalos, R., Long, C., Fontano, E., Balbirnie, M., Grothe, R., Eisenberg, D., Caspar, D.L.D. Cross-beta order and diversity in nanocrystals of an amyloid-forming peptide (2003) Journal of Molecular Biology 330 (5), pp. 1165-1175.</p>
43.	wizualizacja (Imaging) kryształów pod wysokim ciśnieniem	<p>Hemley, R.J., Mao, H.-K., Shen, G., Badro, J., Gillet, P., Hanfland, M., Hausermann, D. X-ray imaging of stress and strain of diamond, iron, and tungsten at megabar pressures (1997) Science 276 (5316), pp. 1242-1245.</p>
44.	wizualizacja polikrystalicznych warstw diamentowych	<p>Kowalski, G., Moore, M., Nailer, S. Application of X-ray phase-contrast imaging to polycrystalline CVD diamond (1999) Journal of Physics D: Applied Physics 32 (10 A), pp. A166-A171.</p>
45.	własności materiałów charakteryzujących się kolosalnym magnetooporem	<p>Tachibana, M., Akiyama, K., Yoshizawa, M., Kawaji, H., Atake, T. Strongly correlated behavior in magnetoresistive Fe_{1-x}Cu_xCr₂S₄ spinels (2005) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics 71 (18), pp. 1-4.</p>
46.	własności nadprzewodników ferromagnetycznych	<p>Mclaughlin, A.C., Janowitz, V., McAllister, J.A., Attfield, J.P. Doping studies of the ferromagnetic superconductor RuSr₂GdCu₂O₈ (2001) Journal of Materials Chemistry 11 (1), pp. 173-178</p>

47.	wpływ światła na segregację fazową	Cox, D.E., Radaelli, P.G., Marezio, M., Cheong, S.-W. Structural changes, clustering, and photoinduced phase segregation in Pr _{0.7} Ca _{0.3} MnO ₃ (1998) <i>Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics</i> 57 (6), pp. 3305-3314
48.	wysokorozdzielcza koronografia	Jin, H., Ham, K., Chan, J.Y., Butler, L.G., Kurtz, R.L., Thiam, S., Robinson, J.W., (...), Tracy, R.E. High resolution three-dimensional visualization and characterization of coronary atherosclerosis in vitro by synchrotron radiation x-ray microtomography and highly localized x-ray diffraction <i>Physics in Medicine and Biology</i> 47 (24),(2002) pp. 4345-4356.
49.	zbieranie danych wysokiej jakości	Wessels, T., Baerlocher, C., McCusker, L.B. Single-crystal-like diffraction data from polycrystalline materials (1999) <i>Science</i> 284 (5413), pp. 477-479.
50.	zeolity I selektywna kataliza	Corma, A., Rey, F., Valencia, S., Jordá, J.L., Rius, J. A zeolite with interconnected 8-, 10- and 12-ring pores and its unique catalytic selectivity (2003) <i>Nature Materials</i> 2 (7), pp. 493-497.

Tabela 2b. Przykłady zastosowań metod SAXS. W tabeli podano również przykładowe prace z udziałem polskim (czcionką wytłuszczoną)

Nr	zastosowanie	literatura
1.	Wykorzystanie techniki GI-SAXS do badania kinetyki wzrostu nanocząstek Pd/MgO i samoorganizującego się układu Co/Au.	Renaud G, Lazzari R, Revenant C, Barbier A, Noblet M, Ulrich O, Leroy F, Jupille J, Borensztein Y, Henry CR, Deville JP, Scheurer F, Mane-Mane J, Fruchart O (2003). Real-time monitoring of growing nanoparticles. <i>SCIENCE</i> 300 (5624), 1416-1419.
2.	Rekonstrukcja kształtu cząsteczek ksylanazy w roztworze w oparciu o dane SAXS zarejestrowane wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego	Maciej Kozak (2006) Solution scattering studies of conformation stability of xylanase XYNII from <i>Trichoderma longibrachiatum</i>. <i>Biopolymers</i> DOI: 10.1002/bip.20531. Porównanie zrekonstruowanych modeli ksylanazy w roztworze ze strukturą w kryształach
3.	Oddziaływania pomiędzy cząsteczkami DNA w obecności różnych kationów i różnej sile jonowej	Qiu XY, Kwok LW, Park HY, Lamb JS, Andresen K, Pollack L. (2006) Measuring inter-DNA potentials in solution. <i>PHYSICAL REVIEW LETTERS</i> 96 (13): Art. No. 138101.
4.	Badania izomerazy glukozy jako potencjalnego wzorca masy cząsteczkowej w badaniach SAXS	Maciej Kozak (2005). Glucose isomerase from <i>Streptomyces rubiginosus</i> – potential molecular weight standard for small angle X-ray scattering. <i>Journal of Applied Crystallography</i> 38(3) 555-558. Dane SAXs zarejestrowane dla BSA ora izomerazy glukozy “starzonej” przez 0-21 dni



5.	Oddziaływania pomiędzy cząsteczkami DNA w obecności różnych kationów	Qiu XY, Kwok LW, Park HY, Lamb JS, Andresen K, Pollack L. (2006) Measuring inter-DNA potentials in solution. PHYSICAL REVIEW LETTERS 96 (13): Art. No. 138101.
6.	Charakterystyka procesu krystalizacji polimerów	<p>Rabiej S, Goderis B, Janicki J, Mathot VBF, Koch MHJ, Groeninckx G, Reynaers H, Gelan J, Wlochowicz A</p> <p>Characterization of the dual crystal population in an isothermally crystallized homogeneous ethylene-1-octene copolymer</p> <p>POLYMER 45 (26): 8761-8778 DEC 9 2004</p> <p>Ewolucja długiego okresu L_p oraz grubości warstwy amorficznej L_a i krystalicznej L_c podczas izotermicznej krystalizacji</p>
7.	Zapaść procesu tworzenia się struktury trzeciorzędowej białka obserwowany z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego i SAXS	Pollack L, Tate MW, Finnefrock AC, Kalidas C, Trotter S, Darnton NC, Lurio L, Austin RH, Batt CA, Gruner SM, Mochrie SGJ (2001). Time resolved collapse of a folding protein observed with small angle x-ray scattering. PHYSICAL REVIEW LETTERS 86 (21): 4962-4965.
8.	Badania powstawania nanostruktur polimerowych w czasie rzeczywistym	<p>Janicki J. (2004) SAXS and WAXD real time studies on nanostructure of selected polymer materials. JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 382 (1-2): 61-67</p> <p>Krzywe SAXS zarejestrowane dla LCO podczas ogrzewania</p>
9.	Przykład wykorzystania techniki SAXS i promieniowania synchrotronowego do monitorowania zmian morfologicznych podczas procesu krystalizacji polimerów.	Verma R, Marand H, Hsiao B (1996). Morphological changes during secondary crystallization and subsequent melting in poly(ether ether ketone) as studied by real time small angle X-ray scattering MACROMOLECULES 29 (24): 7767-7775.
10.	Badania zmian morfologicznych mieszanin polimerowych podczas krystalizacji i	<p>Slusarczyk C (2004)</p> <p>Time-resolved SAXS investigations of morphological changes in a blend of linear and branched polyethylenes during crystallization</p>

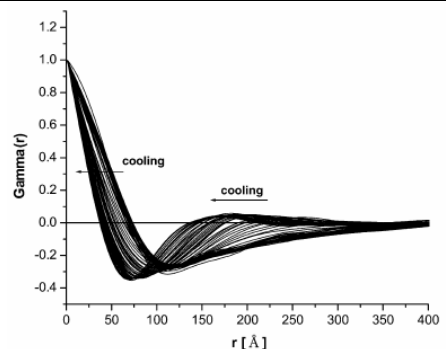
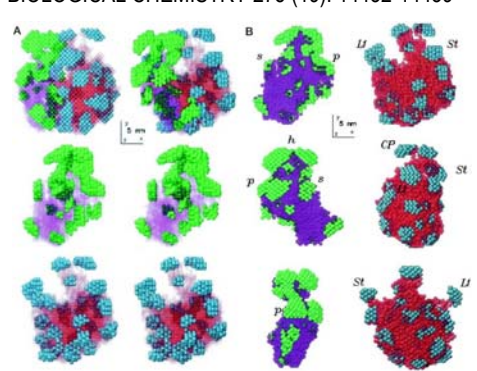
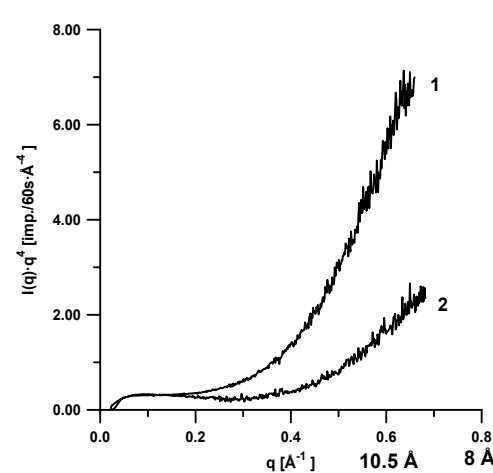
	topienia	<p>and subsequent melting JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 382 (1-2): 68-74</p> <p>Funkcja rozkładu radialnego wyznaczona w oparciu o dane SAXS charakteryzująca proces chłodzenia kopolimeru</p>	
11.	Badania procesu hydratacji białek w roztworze	<p>Svergun DI, Richard S, Koch MHJ, Sayers Z, Kuprin S, Zaccai G. (1998) Protein hydration in solution: Experimental observation by x-ray and neutron scattering. PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA 95 (5): 2267-2272.</p>	
12.	Rozmieszczenie białek na powierzchni rybosomu 70S z E. coli	<p>Svergun DI, Nierhaus KH (2000) A map of protein-rRNA distribution in the 70 S Escherichia coli ribosome JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY 275 (19): 14432-14439</p>	 <p>mapa rozmieszczenia białek</p>
13.	Badania wstępnych etapów tworzenia się mezoporowatej krzemionki SBA-15	<p>Flodstrom K, Teixeira CV, Amenitsch H, Alfredsson V, Linden M. (2004) In situ synchrotron small-angle X-ray scattering/X-ray diffraction study of the formation of SBA-15 mesoporous silica LANGMUIR 20 (12): 4885-4891</p>	
14.	Badania układów porowatych na bazie ZrO ₂	<p>Pikus S, Olszewska E., Kozak M (2004) SAS characterization of organic film deposited on porous silicas. Applied Crystallography pp. 351-354, (Henryk Morawiec and Danuta Stróż; Eds.) World Scientific</p>	 <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content;"> <p>Przykładowe wykresy Poroda dla porowatego ZrO₂ czystego i wypełnionego bromodekanol</p> </div>
15.	Badania układów samoorganizujących	<p>Vos WL, Megens M, vanKats CM, Bosecke P. (1997) X-ray diffraction of photonic colloidal single crystals LANGMUIR 13 (23): 6004-6008</p>	

Tabela 3. Postulowane parametry linii pomiarowej U1.

kod	Parametr	Wartość	Uzasadnienie
SK	źródło (wybór: bending magnet, wiggler, undulator, insertion device)	ondulator	preferencją jest undulator, przy założeniu, że najważniejszym parametrem jest natężenie wiązki monochromatycznej (wyklucza wiązkę białą); zgodne z tendencją na liniach proszkowych obecnie budowanych i projektowanych Uwaga: wybór undulatora może mieć istotny wpływ na pozostałe parametry wiązki
DM	Wymagane wymiary stacji badawczej:	długość min 12 m (aby możliwe było wykorzystanie kamer o długości 8-10 m), szerokość min 5 m wysokość 3 m	podane wymiary - minimalne z punktu widzenia SAXS; nie uwzględnione są ewentualne zmiany jeśli wymaga tego optyka rentgenowska (długość) i ewentualne wymagania jeśli będzie decyzja o budowie poprzecznej ławy optycznej z szynami umożliwiającymi szybką rekonfigurację stacji (takie godne polecenia rozwiązanie jest na stacji GILDA w ESRF)
TH	Temperatura w pomieszczeniu roboczym i w pomieszczeniach w których znajdują się elementy optyki rentgenowskiej	stabilna, (optymalnie 0.1 K)	niestabilność może wpływać na różne parametry (w tym położenie) wiązki
WI	wilgotność w pomieszczeniu pomiarowym	stała	zmiany wilgotności wpływają na natężenie wiązki mierzonej
EF	Energia fotonów	5–30 keV wysoce stabilna i monitorowana	Szerokie spektrum możliwości (vide tekst) dla celów dyfrakcji optymalna energia powinna być w miarę wysoka (w pobliżu 13 keV dla celów SAXS - w pobliżu 8 keV monitorowanie: Pin-diode oraz komora jonizacyjna na wejściu do monitorowania natężenia wiązki pierwotnej
FL	strumień fotonów	jak największy na (małej) próbce	dla istotnej części zastosowań możliwość szybkiego pomiaru decyduje o sukcesie
SP	splitter	beam splitter umożliwiający rozdzielenie funkcji stacji	zastosowanie splittera może niewielkim kosztem przyczynić się do lepszego wykorzystania urządzeń stacji, pod warunkiem, że nie jest w kolizji z innymi elementami optyki przedstawionymi w tabeli; rozdzielenie funkcji mogłoby wyglądać następująco: Linia U1A wszystkie zastosowania oprócz linii U1B, gdzie linia BU1B: - pomiary SAXS lub pomiary wysokociśnieniowe lub pomiary umownie nazwane "materiałoznawczymi" lub pomiary absorpcji. Ewentualny wybór opcji wymaga głębszych studiów w celu optymalnego doboru parametrów. zastosowanie splittera wymaga oddzielnego pomieszczenia dla każdej z podstacji
WI	Wiązka	równoległa z przełączaniem na zogniskowaną	przełączanie określi optymalne dla problemu parametry wiązki: rozdzielczość i ilość fotonów na próbce UWAGA: Na świecie stosuje się wiązkę równoległą lub wiązkę zogniskowaną na próbce; to drugie rozwiązanie może nieco pogorszyć rozdzielczość, pozwalając na istotne zwiększenie strumienia fotonów padających na małą próbkę, wymaga jednocześnie opracowania odpowiedniego układu optycznego pozwalającego zapewnić ogniskowanie dla różnych długości fali i dopasowanie położenia dyfraktometru do aktualnej

			pozycji ogniska wiązki ("przesuwność" wzdłuż kierunku wiązki). (Informacje o rozdzielczości w funkcji optyki rentgenowskiej: [Ref.5])
MO	Monochromator	Double crystal monochromator Si (111) asymetrycznie cięty, chłodzony wodą	rozwiązanie dla celów SAXS - prawdopodobnie do rozważenia dla celów dyfrakcji
FO	System luster ogniskujących:	Mirror - lustro dwusegmentowe, toroidalne, pokrycie - Pt (dla celów SAXS)	rozwiązanie dla celów SAXS - prawdopodobnie do rozważenia dla celów dyfrakcji
XY	Położenie próbki (ogniska) niezależne od energii wiązki –	wysoce stabilne i monitorowane	możliwość skanów energetycznych i badań absorpcji
FS	Rozmiary ogniska	< 1 mm ² położenie stabilne i monitorowane	rozmiary ogniska mogą być różne w zależności od opcji (ogniskowanie/brak ogniskowania)
SX	Wyposażenie stacji pomiarowej dla celów SAXS:	<p>Kamera: podstawowa to najlepiej złożona typu SAXS/WAXS umożliwiająca jednoczesną rejestrację w obu zakresach kątowych. Powinna mieć także możliwość oddzielnej pracy tylko w zakresie SAXS lub WAXS. Kamera SAXS powinna mieć możliwość rozbudowy nawet do 8-10 m aby pokrywać także zakres bardzo niskich kątów 2θ</p> <p>Zakres rejestracji dla metody SAXS, $s = 2\sin\theta/\lambda$: ($1 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ – $6.5 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$) przy rozbudowie do maksymalnej długości kamery ($s < 3 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$)</p> <p>Zakres rejestracji dla metody WAXS 2θ: (5° – 45°, w miarę możliwości nawet do 60°)</p> <p>Detektory: dwuwymiarowe (kamery CCD lub ewentualnie image plate) dla każdego zakresu oraz ewentualnie szybkich pomiarów detektory liniowe oraz detektor APD.</p> <p>Komory pomiarowe:</p> <ul style="list-style-type: none"> ➤ Termostatowana komora do pomiarów cieczowych dla układów biologicznych ➤ Dwie komory temperaturowe dla próbki z możliwością zmiany temperatury w programowanym tempie w zakresie odpowiednio od 20°C do -100°C i od 20°C do 350°C ➤ Komora ciśnieniowa dla próbki z możliwością zmiany ciśnienia w zakresie do 1 GPa oraz zmiany temperatury w programowanym tempie w zakresie 20°C do 300°C ➤ Komora ciśnieniowa do pomiarów próbek cieczowych z możliwością zmiany ciśnienia w zakresie do 500 MPa ➤ oraz temperatury w programowanym tempie w zakresie 20°C do 150°C <p>Wyposażenie dodatkowe:</p> <ul style="list-style-type: none"> ➤ Spektrofotometr UV/Vis do kontroli stężeń próbek biologicznych ➤ Wirówka do zatężania i przygotowywania próbek biologicznych ➤ Termoblok programowany do kontrolowanego przygotowywania próbek z tzw "historią termiczną" lub do termodenaturacji próbek biologicznych ➤ Ekstruder laboratoryjny do produkcji włókien polimerowych z regulowaną szybkością odbioru ➤ Zrywarka laboratoryjna z programowanym przebiegiem naprężeń i rozciągów. 	
LA	Podstawa goniometru i innych urządzeń	ława optyczna z poprzecznym przesuwem	umożliwia szybką rekonfigurację systemu

DY	Wyposażenie stacji pomiarowej dla celów dyfrakcji i reflektometrii również zob. niżej (AZ LI HP HT HV PR i in.)	precyzyjny goniometr ze sterowanym położeniem i nachyleniem próbki, dla geometrii próbki kapilarnej i płaskiej możliwość ciągłego ultra szybkiego obrotu kapilary (do 10 Hz i więcej), możliwość pomiaru w trybie sprzężonym omega/2teta próbka/licznik	
PR	forma próbek	kapilary 0.1- 1 mm, próbki płaskie co najmniej kilkucentymetrowe	
AZ	automatyzacja zmiany próbek	Robot	<p>W warunkach, w których czas ręcznej zmiany próbki może być wielokrotnie dłuższy od czasu pomiaru, rozwiązanie to radykalnie poprawia efektywność pracy, przez co wykorzystanie czasu pomiarowego jest istotnie lepsze; robotyzacja może w istotny sposób zmniejszyć koszty operacji - do niektórych prostszych eksperymentów mogą wystarczyć jedna-dwie osoby, lub nawet możliwe będzie wykonywanie standardowych pomiarów przez załogę danej linii. Można by zysk z istnienia robota podsumować w następujący sposób:</p> <p>można oczekiwać, że działanie robota zapewni pokrycie potrzeb całego kraju w dziedzinie dyfrakcji proszkowej (próbki dające się upakować w kapilarach badane tylko w temperaturze pokojowej i w ciśnieniu atmosferycznym) bez udziału fizycznego "autorów" próbek (jeśli - jak się oczekuje - pomiar trwa 1 sek czy 1 min); szybkie i niedrogie pomiary zapewnione przez robotyzację mogą przyciągnąć przemysł, w tym farmaceutyczny</p> <p>UWAGA: – modelowe rozwiązanie zastosowano na linii ID31 w ESRF. Robot może zmienić tam 50 próbek kapilarnych.</p>
LI	liczniki	<p>A - nowoczesne liczniki jednowymiarowe (cylindryczny detektor paskowy w SLS) lub "klasyczne" (tzn. stosowane od dłuższego czasu) dwuwymiarowe liczniki CCD (np. linie ID31, SNBL w ESRF, służące szybkim pomiarom średniej rozdzielczości</p> <p>B - układy wielu liczników punktowych scyntylacyjnych EDR (Bede) z analizatorami, z dużym zakresem liniowości, służące proszkowym pomiarom wysokorozdzielczym (na liniach zagranicznych liczba takich jednocześnie pracujących liczników dochodzi do dziesięciu)</p> <p>Proponuje się opcję (zastosowaną w projekcie linii na synchrotronie MAX-IV), aby dwa różnego rodzaju liczniki (pozycyjny i punktowy) pracowały równocześnie po dwóch stronach wązki ugiętej. Daje to bardzo ciekawą w pewnym sensie rewolucyjną opcję pomiarową</p>	<p>Wybór liczników może być zawężony w pierwszym etapie działania linii - ze stratą dla jakości wyników; dokładne określenie opcji w chwili obecnej nie wydaje się celowe ze względu na szybkie zmiany w technologii liczników pozycyjnych (określającej wydajność, zakres liniowości, optymalny zakres energii dla danego licznika).</p> <p>Układ B jest m.in. zalecany do pomiarów najwyższej rozdzielczości i do pomiarów reflektometrycznych.</p>
HP	układy do badań w funkcji ciśnienia (w zakresie wysokich ciśnień) z komorą diamentową	dwie identyczne komory z ciśnieniem sterowanym membraną- w komplecie wyposażenia musi być doskonały mikroskop optyczny z obrazem wyświetlanym na dużym ekranie i układ elektroerozyjny do wykonywania otworów	
HT	komory temperaturowe	nisko- i wysokotemperaturowa	
HV	komory inne	próżniowe i/lub zapewniające atmosferę wybranych gazów - w funkcji potrzeb użytkowników.	

5.3.3 Linia W2: Mikroskopia twardego promieniowania X, mikrotomografia

Źródło:	wiggler	Zakres energii fotonów:	5 – 30 keV
Koordynator: Wojciech M. Kwiatek (Instytut Fizyki Jądrowej PAN)			

Mikrowiązka promieniowania synchrotronowego powinna umożliwić stosowanie następujących metod pomiarowych:

- Mikro-fluorescencja wzbudzana promieniowaniem X (μ XRF, μ -X-Ray Fluorescence),
- Mikro-spektroskopia absorpcyjna (μ -XANES/EXAFS, μ X-ray absorption near edge structure/extended x-ray absorption fine structure spectroscopy)
- Mikro-tomografia komputerowa (μ -CMT, μ -Computer Micro-Tomography),
- Mikro-dyfrakcja (μ -XRD, μ -X-ray diffraction),
- Mikro-rozpraszane niskokątowe (μ -SAS, μ -Small Angle Scattering)
- Mikro-radioterapia (MRT, Micro RadioTherapy) (propozycja na przyszłość)

W tych wszystkich metodach źródłem promieniowania jest mikrowiązka promieniowania synchrotronowego uzyskana z wigglera nadprzewodzącego. Po przejściu przez układy ogniskujące, monochromaryzujące oraz układy normalizujących komór jonizacyjnych strumień fotonów może zostać w łatwy sposób zogniskowany do rozmiarów plamki o wymiarach $5 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ i może osiągać wartości rzędu 10^{18} fotonów/(s \cdot 0,1%BW). Zogniskowana mikro-wiązka fotonów pada na tarczę pomiarową umieszczoną w uchwycie sterowanym przez układ pozycjonujący zbudowany w oparciu o wysokiej klasy precyzyjne silniki krokowe i/lub umieszczone w głowicy wysokiej precyzji goniometru.

Analizy mikro-fluorescencji charakterystycznego promieniowania X pozwalające na określenie składu i rozkładu pierwiastków śladowych w różnorodnych materiałach zarówno w ciele stałym, cieczach jak i materiale biomedycznym będą prowadzone w oparciu o rejestrację widm, z pomocą detektora Si(Li) ustawionego pod kątem 90° do wiązki padającej, zapewniając w ten sposób minimalizację tła pochodzącego od rozproszonych kwantów padającego promieniowania synchrotronowego. Wymaganymi parametrami detektora są: duża powierzchnia czynna, przy równoczesnej wysokiej energetycznej zdolności rozdzielczej oraz dostatecznie duża wydajność dla niskich energii promieniowania rentgenowskiego. Dużą wydajność w niskich energiach umożliwi użycie detektora z bardzo cienkim okienkiem berylowym oraz ze zmniejszonym pochłanianiem w warstwie martwej, przez zastąpienie złotych kontaktów kryształu kontaktami wykonanymi z aluminium. Najlepsze energetyczne zdolności rozdzielcze detektora osiąga się przy długich stałych formowania impulsu, powyżej 20 μs . Dla tak długich impulsów standardowe układy akwizycji nie pracują prawidłowo i należy zastosować układ akwizycji ze wzmacniaczem wykorzystującym procesor sygnałowy dla próbkowania kształtu impulsu. Zastosowanie monochromatora pozwoli na pomiar krawędzi absorpcji.

Możliwość pomiaru krawędzi absorpcji, jej struktury oraz obszaru pozakrawędziowego pozwoli na określenie stopnia utlenienia badanych pierwiastków jak również lokalnych struktur wokół atomu centralnego. Zastosowanie mikrowiązki z możliwością translacji badanego obiektu umożliwi dodatkowo sporządzenie map przestrzennych rozkładów zmian stopnia utlenienia. W tym celu zastosowane zostaną metody XANES/EXAFS. Dodatkowymi zaletami wspomnianych metod jest możliwość określenia funkcji gęstości stanów elektronowych pozwalających na określenie struktur krystalograficznych.

W metodzie CMT badany przedmiot prześwietlany jest promieniowaniem synchrotronowym, a obraz rejestruje się kamerą CCD o dużej czułości i dużej zdolności rozdzielczej. Badany przedmiot jest umieszczony na głowicy goniometru. Z wielu obrazów zdjętych pod różnymi kątami, program komputerowy odtwarza trójwymiarowy obraz przedmiotu. Położenie przedmiotu kontrolowane jest z pomocą mikroskopu optycznego. Zdolność rozdzielcza metody zależy od rozmiarów źródła promieniowania, a powiększenie obrazu od stosunku odległości przedmiotu od detektora do odległości przedmiotu od źródła promieniowania. W praktyce osiąga się powiększenia około kilku tysięcy razy, a przy takiej wiązce, jaka jest proponowana, powinno się rozróżnić szczegóły mniejsze od 1 μm . W ten sposób można nawet uzyskać możliwość rejestracji 3-wymiarowych obrazów pojedynczych komórek biologicznych.

Pomiary mikro-krystalograficzne prowadzi się podobnie, jak pomiary w metodzie CMT. Kamera CCD rejestruje wtedy obraz interferencyjny, dający informację o budowie krystalicznej próbki oraz o orientacji przestrzennej jej osi krystalograficznych.

Innym, innowacyjnym zastosowaniem mikrowiązek promieniowania synchrotronowego o dużych energiach jest radioterapia. Radioterapia przy wykorzystaniu mikrowiązek synchrotronowego promieniowania rtg. jest jednym z nowo opracowywanych sposobów terapii raka. Tak jak w przypadku terapii radiacyjnej z modulacją natężenia, tomoterapii, czy terapii protonowej, jest tu możliwe niezwykle precyzyjne dostarczenie ściśle określonej dawki w żądane miejsce. Metoda synchrotronowej radioterapii mikrowiązkowej rozwijana jest m. in. w ośrodkach synchrotronowych w Brookhaven National Laboratory w USA, W Europejskim Centrum Synchrotronowym ESRF w Grenoble, a także zawierają ją programy rozwoju nowo budowanych ośrodków w Australii, Hiszpanii oraz w Japonii, gdzie planuje się nawet budowę całego synchrotronu dedykowanego zastosowaniom medycznym.

Metoda ta polega na wytworzeniu wielu mikrowiązek o rozmiarach od 1- 30 μm odległych od siebie o dziesiątki-setki mikronów. Wykazano, że dawki krytyczne promieniowania zależą od napromieniowanej objętości tkanki i są tym wyższe im ta objętość jest mniejsza. Pozwala to na modyfikację klasycznych schematów radioterapii, np. poprzez wprowadzanie ogniskujących się w określonym punkcie tkanki mikrowiązek, dostarczających „bezpiecznie” poprzez otaczające tkanki większych dawek promieniowania. Połączenie naświetlania mikrowiązkami promieniowaniem monochromatycznym o ściśle określonej energii fotonów z zastosowaniem specyficznych leków łączących się np. z materiałem genetycznym transformowanej tkanki, pozwala na wydajne selektywne niszczenie tkanki nowotworowej. Jedną z metod polega na zastosowaniu w tym celu związków platyny. Absorpcja fotonów dostarczanych przez silne mikrowiązki o energii tuż powyżej krawędzi absorpcji K platyny (ok. 78.4 keV) powoduje emisję elektronów Augera, które w wyniku absorpcji w uszkodzonych komórkach są w ten sposób uśmiercane. Droga swobodna e. A. Jest na tyle mała, że uszkodzenia tkanek zdrowych, w których nie ma związku platyny, jest nieistotnie małe. Duże nadzieje wiąże się z rozwijaną metodą w przypadku pewnych nowotworów mózgu, które nie poddają się innym formom terapii.

Zbadania, rozwiązania bądź udoskonalenia wymaga tu wiele zagadnień, począwszy od określenia dawek terapeutycznych i związanych z tym problemem precyzyjnego pomiaru dawki w mikroobszarach, poprzez konstrukcję nowych przyrządów dozymetrycznych i detekcyjnych dla celów terapii, pozwalających stosować radioterapię mikrowiązkową.

Jednakże z uwagi na wymogi energetyczne stawiane mikrowiązkom promieniowania synchrotronowego dla potrzeb radioterapii nowotworów u człowieka, budowa takiego stanowiska może rozpocząć się w drugim etapie budowy linii pomiarowych. DO tego czasu

istniejąca linia pomiarowa będzie mogła być wykorzystana do celów badawczych mających za zadanie m.in. opracowanie procedur dla terapii.

3. Przykłady dotychczas uzyskanych wyników

Zakres tematyczny proponowanej linii pomiarowej **W2** znajduje liczne zastosowania promieniowania synchrotronowego do rozwiązywania zagadnień biomedycznych, które publikowane są w wielu czasopismach naukowych. Analizy składu i rozkładu pierwiastków śladowych w połączeniu z określeniem stopnia utlenienia wybranego metalu grupy 3d prowadzone są na synchrotronach przez wielu naukowców z Polski. Przykładowo, prace W. Kwiatka i M. Lankosza pokazują jak można w łatwy sposób połączyć zastosowanie szeregu technik mikrowiązkowych.

5.3.4 Linia M3: Linia niskich energii (NIR, Vis, UV, miękkie promieniowanie X)

Spektroskopia fotoelektronowa, soft x-ray wzbudzone widma luminescencji, kinetyki luminescencji, fotochemia, dichroizm kołowy, magnetyczny dichroizm kołowy, fluorescencja i czasy życia fluorescencji roztworów, gazów i ciała stałego.

Źródło: magnes odchylający		Zakres energii fotonów:	1- 250 eV
Koordinator: Krzysztof Polewski (Akademia Rolnicza w Poznaniu)			

Dzięki dużej rozdzielczości czasowo-przestrzennej istnieje możliwość obserwacji zjawisk zachodzących w czasie pikosekund w obszarach o liniowych wymiarach rzędu 0.01 mm co otwiera nowe obszary badawcze we wszystkich dziedzinach nauk podstawowych i stosowanych. Wydaje się, że oprócz fizyków i chemików dużą grupę użytkowników powinni stanowić biolodzy molekularni oraz nanotechnolodzy. Pozyskanie tej grupy będzie jednym z ważnych zadań powstającego Komitetu linii. Na bazie tej linii dzięki komplementarności stacji pomiarowych mogą być badane zjawiska z zakresu fizyki, chemii, biologii oraz nanotechnologii

Podstawowym źródłem promieniowania powinien być undulator ewentualnie magnes zakrzywiający, który zapewni odpowiednie natężenie w proponowanym zakresie energii oraz dostarczy światło liniowo spolaryzowane. Zastosowanie odpowiednich polaryzatorów pozwoli na otrzymanie promieniowanie kołowo spolaryzowanego, które będzie wykorzystane do pomiarów dichroizmu kołowego.

W przypadku pomiarów z zastosowaniem dichroizmu kołowego używa się modulatorów optycznych jednak ze względu na własności materiałów może być stosowane w zakresie do 10 eV ($\lambda > 120$ nm). Przy wyższych energiach w zakresie soft x-rays konwersja liniowo spolaryzowanego promieniowania w światło kołowo lub eliptycznie spolaryzowane zachodzi w wyniku kolejnych odbić od odpowiednich kryształów. W związku z tym takie urządzenie należałoby uwzględnić zestawiania stanowiska końcowego linii.

Innym rozwiązaniem dla otrzymania światła spolaryzowanego może być zastosowanie wewnątrz prostoliniowej części ringu, oprócz undulatora, jako insertion device specjalnego wiglera dającego eliptycznie lub kołowo spolaryzowane promieniowanie. Zaletą takiego rozwiązania jest brak konieczności budowania całej części polaryzującej na stanowisku końcowym linii.

Obecnie działające oraz budowane synchrotrony dla omawianego zakresu promieniowania wykorzystują zarówno undulatory jak i magnesy zakrzywiające.

Ze względu na proponowany zakres widmowy wydaje się uzasadnionym aby na tej linii zbudować przynajmniej dwie równoległe stacje pomiarowe. W związku z tym jest konieczne zastosowanie co najmniej dwóch zwierciadeł w celu otrzymania możliwie największej jasności oraz pokrycia proponowanego zakresu widmowego na stanowisku pomiarowym.

Dwie na przemian działające stacje pomiarowe pozwolą na większą specjalizację każdej z nich. Jedna stacja może pracować w zakresie 10 –250 eV, a druga w zakresie od 1 do 10 eV. Podyktowane to jest głównie faktem, że optyka stosowana w tych dwóch zakresach pomiarowych różni się znacząco pod względem zastosowanych materiałów.

Zastosowane monochromatory, optyka, polaryzatory, detektory promieniowania oraz inne elementy optyczne linii będą związane ze stosowanym zakresem promieniowania.

We wszystkich zgłoszonych zastosowaniach konieczne jest użycie komór pomiarowych do badań w wysokiej próżni.

Możliwe metody i obszary badawcze, które mogą być realizowane przy użyciu promieniowania synchrotronowego na linii M3.

-Pomiary fluorescencji oraz dichroizmu kołowego w zakresie UV będą wykorzystane do badania struktury roztworów oraz dynamiki molekuł biologicznych jak, DNA, RNA, białka i polisacharydy.

-Fluorescencja.

-Absorpcja gazów (statyczna i jet)

-Fotodestrukcyjja materiałów biologicznych (poziom molekularny i komórkowy)

-Luminescencja, wzbudzenie i emisja, powierzchni ciała stałego

-Fotochemia gazów, cieczy i ciała stałego

-Spektroskopia, absorpcja i fluorescencja, wysokiej rozdzielczości w zakresie soft x-ray atomów, klastrów i ciała stałego

-Spektroskopia fotoelektronowa atomów, molekuł, gazów i ciała stałego

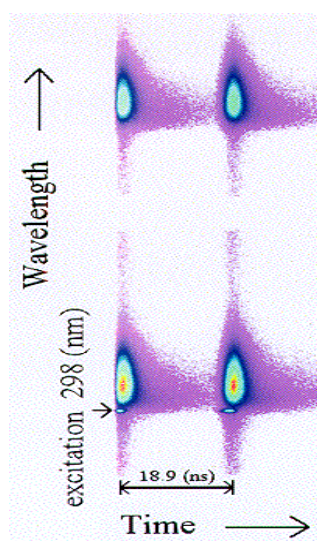
-Fotojonizacja molekuł i klastrów

-Kątowo- i spinowo- rozdzielcza spektroskopia fotoelektronów

Przykłady wyników uzyskanych na zagranicznych synchrotronach

Jednoczesny pomiar widma fluorescencji, anizotropii fluorescencji oraz czasów życia fluorescencji przy pomocy position-sensitive detektora.

Spektrograf daje rozszczepione widmo fluorescencji wzdłuż jednej osi fotokatody, polaryzator Wollastona rozdziela widma na dwie składowe prostopadle do kierunku rozszczepienia widmowego. Poprzez odpowiednie adresowanie przychodzących fotonów buduje się histogram w którym zakodowane są wszystkie informacje opisujące fluorescencję danego związku.

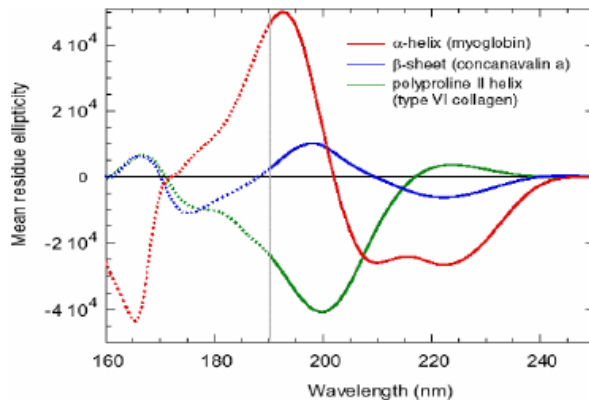


Przykład jednoczesnego pomiaru widma fluorescencji, składowych polaryzacji fluorescencji oraz czasów życia pojedynczego tryptofanu z zewnętrznej warstwy białka A spirochete *Borrelia burgdorferi* etiologicznego czynnika w boreliozie (Lyme disease) otrzymanych w NSLS, linia U9B

Time resolved fluorescence polarization measurements for entire emission spectra with a resistive-anode, single-photon-counting detector: the Fluorescence Omnilyzer. Lisa A. Kelly, John G. Trunk, and [John C. Sutherland](#) *Rev. Sci. Instr.* 68(6), 2279-2286 (1997).

Pomiar dichroizmu kołowego białek w celu obliczenia struktury drugorzędowej białek.

Metoda dichroizmu kołowego jest najszybszą metodą określenia struktury drugorzędowej w białkach. Dostępne komercyjne przyrządy mają ograniczony zakres pomiarowy do 195 nm co w istotny sposób ogranicza dokładność obliczenia struktury drugorzędowej białka gdyż około połowy widma CD i informacja w nim zawarta nie jest brane pod uwagę. Promieniowanie synchrotronowe pozwala zapisać całe widmo dzięki czemu wzrasta dokładność określenia udziału poszczególnych struktur drugorzędowych w białku.



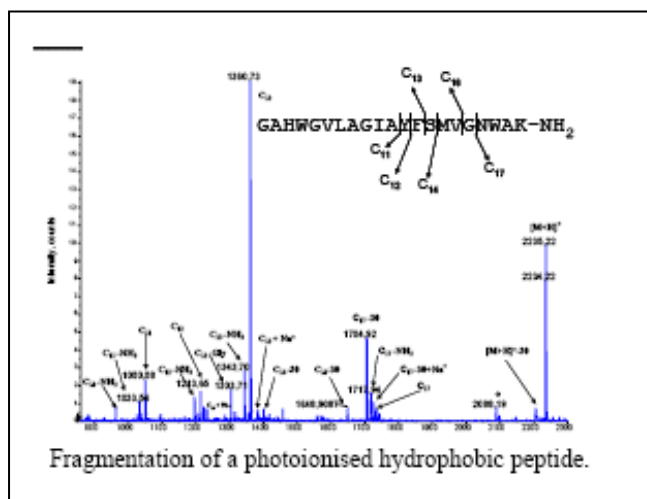
CD spectra of proteins with different secondary structure contents obtained on the SRS at the Daresbury Laboratory. The dashed parts of the spectra correspond to the wavelength range which cannot be obtained with classical instrument. From Wallace & Janes'

Widma CD białek o różnej zawartości struktur drugorzędowych pokazujących jaka część widma może być uzyskana przy zastosowaniu promieniowania synchrotronowego.

Wallace, BA & Janes, RW (2001) Current Opinion Struct. Biol. 5, 567-571

Do obliczenia zawartości poszczególnych struktur drugorzędowych używa się specjalnych programów wymagających od użytkownika pewnej wiedzy na temat jego działania. Obecnie został stworzony serwer DICHROWEB który pozwala nawet na analizę on-line uzyskanych danych spektroskopowych CD gdzie jedyną wartością, którą należy podać jest dokładne stężenie białka. Więcej informacji dostępnych jest pod adresem <http://www.cryst.bbk.ac.uk/cdweb>.

Spektrometria masowa fragmentów uzyskanych podczas fotojonizacji



Fragmentation of a photoionised hydrophobic peptide.

Przykładowe widmo masowe uzyskane na lini VUV SOLEIL

Badanie zmian konformacyjnych białek przy pomocy transferu energii in situ

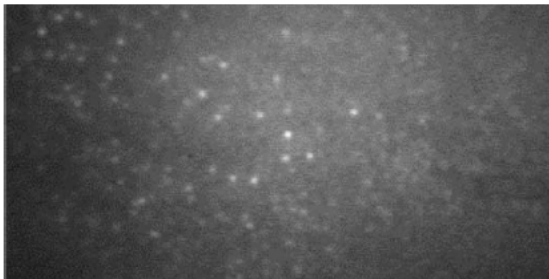
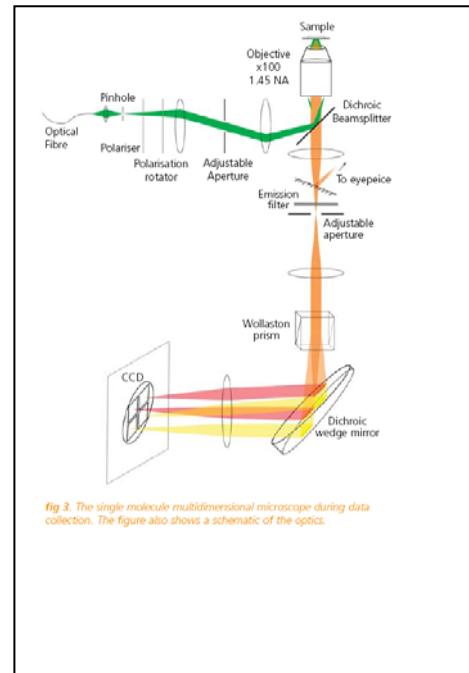
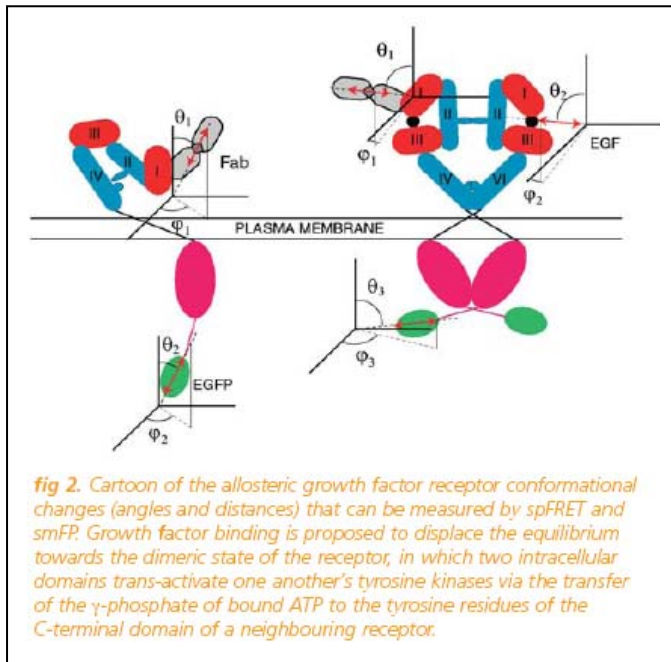


fig 4. shows the first single molecule image collected with the microscope displaying raw data from Cy3 molecules in distilled water, averaged over 4 frames (33 ms per frame). The detector used was an intensified CCD camera.

Wyniki uzyskanie w SRS at Daresbury Laboratory

J Slechlessinger, Ligand-induced, Receptor-mediated Dimerisation and Activation of EGF Receptor. Cell 2002, 110, 669-672.

5.3.5 Linia U3: Spektroskopia miękkiego promieniowania X

Spektroskopia fotoelektronów, absorpcja promieniowania rentgenowskiego, emisja rentgenowska, rezonansowe elastyczne i nieelastyczne rozpraszanie promieniowania rentgenowskiego

Źródło: undulator		Zakres energii fotonów:	20 – 1600 eV
Koordinatorka: Jacek Szade (Uniwersytet Śląski)			

Źródło – **ondulator o zmiennej polaryzacji** – niezbędny do pomiarów fotoemisji oraz absorpcji w funkcji polaryzacji promieniowania. Umożliwi on wykorzystanie jednej linii do kilku technik badawczych intensywnie rozwijających się w ostatnich latach, takich jak: fotoemisja rezonansowa, fotoemisja kątowno rozdzielcza, kołowy dichroizm magnetyczny (XMCD), dichroizm kołowy i liniowy w fotoemisji, jak również nowej techniki – zależnej od polaryzacji promieniowania - rezonansowego nieelastycznego rozpraszania promieniowania rentgenowskiego (RIXS). Instalacja spektrometru miękkiego promieniowania rentgenowskiego niezbędnego do tej ostatniej techniki mogłaby nastąpić w dalszym etapie rozbudowy linii eksperymentalnej.

Ondulator zapewnia wysoką intensywność promieniowania i umożliwia szybką zmianę polaryzacji.

Budowane w ostatnich latach linie eksperymentalne, gdzie główną techniką jest spektrometria fotoelektronów, wykorzystują jako źródło promieniowania ondulatory.

Monochromator – np. typu PGM (plane grating monochromator) zapewniający rozdzielczość promieniowania $E/\Delta E \sim 10^4$.

Zakres energetyczny 20-2000 eV. Taki zakres dostępnych energii fotonów pozwala zarówno prowadzić eksperymenty fotoemisyjne z wykorzystaniem zjawiska rezonansu typu Fano dla materiałów zawierających metale przejściowe (30-80 eV) jak i pierwiastków ziem rzadkich (100-2000 eV). Zakres 20-200 eV (przy dostatecznie wysokich zdolnościach rozdzielczych monochromatora oraz analizatora energii elektronów) umożliwia pomiary metodą kątowno-rozdzielczej spektroskopii fotoelektronów. Wyższe energie są niezbędne zarówno dla zastosowań analitycznych spektroskopii fotoemisyjnej jak i pomiarów XMCD czy RIXS.

Stacja pomiarowa

Całość stacji pomiarowej wymaga ultra-wysokiej próżni ok. 10^{-10} mbar

Zasadniczą częścią stacji będzie **spektrometr fotoelektronów** z detektorem wielokanałowym o rozdzielczości energetycznej rzędu 10 meV.

Spektrometr fotoemisyjny wraz z manipulatorem powinien umożliwiać pomiary metodą kątowno-rozdzielczej spektroskopii fotoelektronów.

Spektrometr powinien być wyposażony w manipulator z 5 stopniami swobody i możliwością chłodzenia do 77 K, lub z 4 stopniami swobody chłodzony do temperatur helowych oraz możliwością grzania do ok. 1000 C. Ze względu na pomiary dichroizmu magnetycznego konieczne jest umożliwienie magnesowania próbki w komorze. Niezbędna jest śluza - komora typu „fast entry” do wprowadzania próbek

Jako dodatkowe wyposażenie potrzebne są:

- Działo jonowe pompowane różnicowo

- Łamacz kryształów (crystal cleaver)

Pomiar absorpcji można prowadzić metodą TEY (Total Electron Yield) lub całkowitej fluorescencji w przypadku zainstalowania detektora lub spektrometru promieniowania.

Docelowo planuje się zainstalowanie fluorescencyjnego spektrometru rentgenowskiego np. typu ComIXS (na wzór linii BACH na synchrotronie ELETTRA)

Obszary badawcze

Zakres energii promieniowania obejmuje krawędzie absorpcji wszystkich pierwiastków istotnych ze względu na badania nowych materiałów, w tym materiałów wykazujących moment magnetyczny. Umożliwia to badanie zarówno materiałów o charakterze objętościowym jak i cienkich warstw istotnych dla nowej dziedziny nauki i techniki – spintroniki.

Fotoemisja rezonansowa pozwala na stwierdzenie lokalizacji określonych stanów w paśmie walencyjnym – informacji o podstawowym znaczeniu w badaniu nowych materiałów. Spektrometr umożliwi wykonywanie eksperymentów metodą kątowno-rozdzielczej spektroskopii fotoemisyjnej **ARUPS** (Angular Resolved Ultraviolet Photoemission Spectroscopy). Metoda ta jest powszechnie uznana za niezastąpione narzędzie w badaniach struktury elektronowej ciał stałych. Pozwala na zrekonstruowanie zależności $E(\mathbf{k})$ (gdzie \mathbf{k} to wektor falowy elektronu) wzdłuż różnych kierunków wysokiej symetrii w całej strefie Brillouina (patrz przykłady). Układy eksperymentalne umożliwiające podobne badania istnieją we wszystkich rozwiniętych laboratoriach synchrotronowych dostarczających fotonów o potrzebnej energii (20-200 eV). Dzięki nim możliwe jest badanie struktur pasmowych nowych materiałów, również warstw epitaksjalnych i układów dwuwymiarowych.

Badania wykorzystujące dichroizm magnetyczny pozwolą na uzyskanie informacji o lokalnym momencie magnetycznym związanym z poszczególnymi pierwiastkami.

Stacja robocza będzie wykorzystana w wielu dziedzinach:

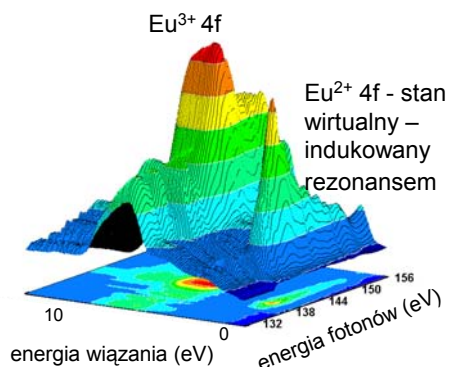
- badanie nowych materiałów, w tym cienkich warstw i układów wielowarstwowych, ceramik, nanomateriałów i kompozytów,
- badanie reakcji zachodzących na powierzchni ciał stałych
- badanie absorpcji i katalizy (możliwość przyłączenia komory przygotowawczej, gdzie można prowadzić reakcje substratu z różnymi gazami)
- badanie magnetyzmu powierzchniowego
- badanie biomateriałów
- badania związane z biotechnologią
- badania minerałów

Wzorcem proponowanej linii eksperymentalnej może być linia BACH na synchrotronie ELETTRA, podobne parametry posiadają linie APE i SuperESCA w Trieście, a także linia SGM na nowym synchrotronie kanadyjskim. Możliwość pomiaru trzema technikami (XPS, XAS i XES) wytepuje również na linii I511 w MaxLab.

Przykłady najnowszych wyników uzyskanych na synchrotronach europejskich:

- „Gigantyczny” rezonans Eu 4d-4f
($h\nu=130-155$ eV)

fotoemisyjne pasmo walencyjne ultra-
cienkiej warstwy EuF_3/Fe uzyskanej
metodą MBE

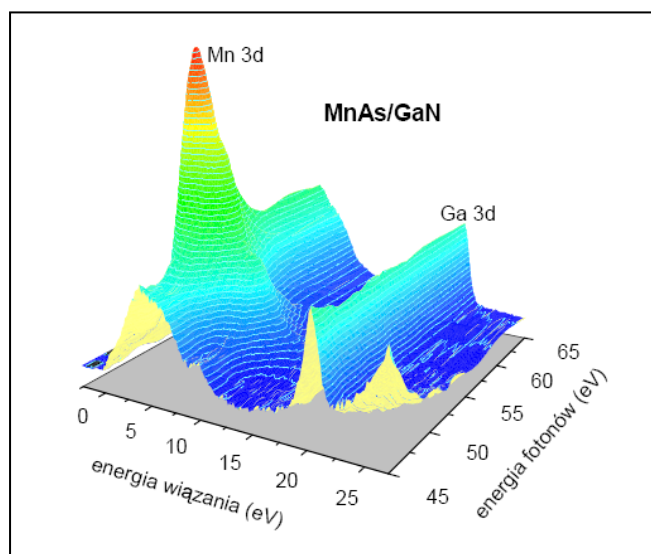


W warstwie EuF_3
stany dwuwartościowego
Eu występują tylko w
widmach fotoemisji dla
energii fotonów bliskich
rezonansu Eu 4d-4f

Polaryzacja magnetyczna
pochodząca od warstwy Fe
prowadzi do słabego
dichroizmu magnetycznego
dla stanów Eu w EuF_3

W. Burian, J. Szade, Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski, Katowice
współpraca: M. Zangrando, F. Bondino, E. Magnano – TASC - ELETTRA, Włochy
Z. Celiński, T. O’Keevan - Uniwersytet Colorado, USA

Badania metodą fotoemisji rezonansowej materiałów zawierających metale przejściowe:



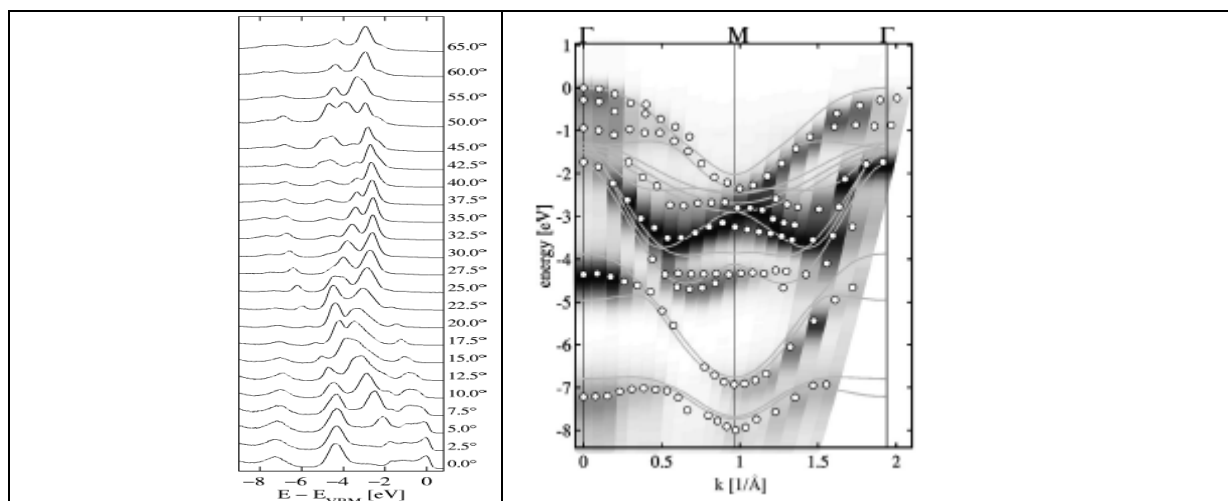
Pasmo walencyjne i najwyższy stan rdzeniowy Ga3d obserwowane dla warstwy kropek MnAs wyhodowanej metodą MBE na powierzchni GaN(000-1)-(1x1). MnAs jest materiałem o potencjalnych zastosowaniach spintronicznych. Na powierzchni azotku galu wyrósł w postaci spontanicznie uformowanych kropek o rozmiarach rzędu 40 nm. Pomiary fotoemisyjne pozwoliły wykryć zależność ich struktury elektronowej od przebiegu procesu wzrostu.

B.J. Kowalski, I.A. Kowalik, R.J. Iwanowski, K. Kopalko, E. Łusakowska, M. Sawicki
Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk,
J. Sadowski
MAX-lab, Lund University, Szwecja i Instytut Fizyki PAN
M. Adell
Department of Physics, Chalmers University of Technology and Goeteborg University, Szwecja
I. Grzegory, S. Porowski
Instytut Wysokich Ciśnień Polskiej Akademii Nauk, Warszawa

Kątowo-rozdzielcza spektroskopia fotoemisyjna:

Selenek galu to półprzewodnik warstwowy, budzący zainteresowanie m.in. ze względu dwu- i trójwymiarowy charakter stanów elektronowych pomimo silnie anizotropowej struktury krystalicznej a także własności mechanicznych.

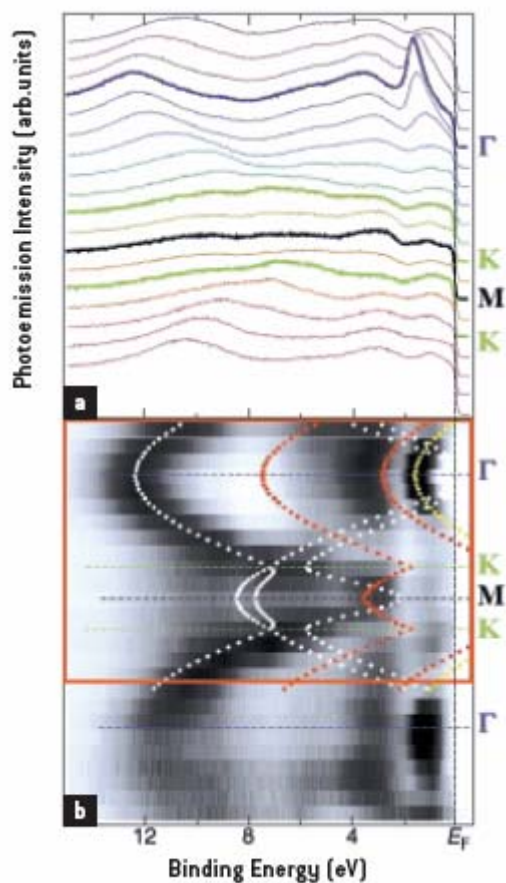
Zastosowanie kątowo-rozdzielczej spektroskopii fotoemisyjnej pozwoliło szczegółowo zbadać strukturę pasmową tego materiału, określić dyspersję pasm zarówno w płaszczyźnie warstw struktury krystalicznej jak i w kierunku prostopadłym nich. Dane zebrane przy energiach fotonów 15-31 eV mogły zostać skonfrontowane z dużą precyzją z rezultatami obliczeń *ab initio* struktury elektronowej.



Zbiór widm fotoemisyjnych zebranych dla GaSe w płaszczyźnie emisji Γ KMLHA przy energii fotonów 23 eV oraz diagram struktury elektronowej w kierunku Γ M Γ . Punkty odpowiadające strukturom widm fotoemisyjnych oraz rezultaty obliczeń struktury pasmowej (linie) nałożono na dwuwymiarowy diagram wyników doświadczalnych (stopień zaczerwienia odpowiada natężeniu emisji).

L. Pluciński, R.L. Johnson
Hamburg University, Niemcy
B.J. Kowalski, K. Kopalko, B.A. Orłowski,
Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Warszawa
Z.D. Kovalyuk, G.V. Laskharev
Institute for Problems of Material Science, National Academy of Sciences of Ukraine
Phys. Rev. B 68, 125304 (2003)

Przykład badań przeprowadzonych tą metodą na układzie SuperESCA w laboratorium synchrotronowym ELETTRA:



C. Cepek, R. Macovez, L. Petaccia, S. Lizzit, A. Goldoni, R. Larciprete, M. Sancrotti
“Angle-resolved photoemission and characterization of ordered MgB₂ films epitaxially grown on Mg(0001)”
ELETTRA Research Highlights 2005 p. 32

Dyspersja pasm warstwy epitaksjalnej MgB₂ o grubości 18 ML, wzdłuż kierunku Γ -K-M-K- Γ . **(a)** Widma fotoemisyjne pasma walencyjnego zmierzone w funkcji kąta emisji przy energii fotonów 105 eV. **(b)** Obliczone pasma stanów objętościowych MgB₂ wzdłuż kierunku Γ -K-M (białe i czerwone punkty) oraz stanów powierzchni zakończonej magnezem (żółte punkty) nałożone na dwuwymiarowy diagram danych doświadczalnych. Stopień zaczerńnienia odpowiada natężeniu emisji.

5.3.6 Linia M4: Spektroskopia bliskiej i dalekiej podczerwieni, mikroskopia Spektroskopia oscylacyjna, mikrospektroskopia IR

Źródło:	magnes odchylający	Zakres liczby falowej:	10 - 4000 cm ⁻¹
Koordynator: Mirosław Handke (Akademia Górniczo-Hutnicza)			

Źródło (SRIR) – wiązka fotonów jest zwykle wydzielona z magnesu odchylającego (bending magnet) np. pod kątem prostopadłym ok. 40 mrad (warunki te mogą być inne). Konieczne jest zastosowanie pary zdalnie kontrolowanych szczelin pozwalających na zebranie promieniowania o ustalonej dawce i polaryzacji w funkcji energii fotonów. Wiązka jest dalej przepuszczana przez okienko z powłoką (CVD) diamentową i skierowana poprzez układ kolimujący do układu optycznego spektrometru FTIR. Na tym etapie wiązka może być podzielona co umożliwia jednoczesną pracę kilku spektrometrów. Wiązka SRIR przy odpowiednio zaprojektowanym synchrotronie może mieć intensywność o około dwa rzędy (przy 100µm) wyższą niż w powszechnie stosowanych klasycznych źródłach termicznych. Najbardziej pożytecznym, z punktu widzenia zastosowań jest zakres długości fal od 2,5 µm do 1000 µm (4000cm⁻¹ do 10cm⁻¹). Zakres ten, poprzez zastosowanie okienek z różnych materiałów może (i powinien być) podzielony na dwa podzakresy: daleką podczerwień – FIR (400 – 10cm⁻¹) oraz środkowa podczerwień (4000 – 400cm⁻¹).

Stacja pomiarowa – nie wymaga wysokiej próżni – UHV, wystarczy HV, która wystarczająco ogranicza stężenie przeszkadzających gazów (np. pary wodnej i CO₂). Wskazane byłoby rozdzielenie wiązki i wyposażenie stacji w minimum dwa spektrometry (optymalnie trzy) jeden obsługujący pomiary mikrospektrometryczne w zakresie MIR a drugi spektrometr (lub dwa równoległe) na zakresy FIR i MIR do pomiarów widm z zastosowaniem różnych, silnie ograniczających energie wiązki, technik pomiaru (sampling techniques) (ATR, photoacoustic itp.). Z oferowanych obecnie na rynku komercyjnych spektrometrów FTIR rekomendować można spektrometr VERTEX 80v oraz mikrospektrometr HYPERION 3000 firmy Bruker. Korzystnym w projektowaniu synchrotronowej linii IR może być porównanie z istniejącymi już kilka lat liniami IR przy synchrotronach: DAΦNE (Włochy) - linia SINBAD, dwie linie SMIS i AILES synchrotronu SOLEIL (Francja) czy linia U10B synchrotronu w Brookhaven (USA).

Korzyści pomiarowe wynikające z zastosowań synchrotronowego źródła promieniowania podczerwonego (SRIR) – spektroskopia oscylacyjna w zakresie podczerwieni jest jedna z najszerzej stosowanych metod badawczych w chemii, mineralogii, biochemii czy inżynierii materiałowej. Jej podstawowym ograniczeniem jest stosunkowo niski w stosunku do szumów sygnał pomiarowy. Zastosowanie technik fourierowskich w latach 70-tych, znacząco ten stosunek poprawiło (zysk multipleksowy i aperturowy). Dzięki metodzie FTIR możliwym było stosowanie wielu nowych technik pomiaru np. mikrospektrometrii, fotoakustyki. Kolejnym etapem w rozszerzeniu zastosowań badawczych FTIR jest zwiększenie (o ok. 2 rzędy) intensywności źródła promieniowania IR przez zastąpienie klasycznych źródeł termicznych promieniowaniem synchrotronowym – SRIR. Łączne zastosowanie metody FTIR oraz źródła synchrotronowego znacząco poszerzy obszar zastosowań badawczych tej techniki.

Obszary badawcze spektroskopii FTIR z zastosowaniem promieniowania synchrotronowego generalnie są takie same jak tradycyjnej spektroskopii FTIR z tą zasadniczą różnicą, że dzięki ok. 100 razy wyższej intensywności źródła można mierzyć znacznie lepszej jakości widma w trudnych

energetycznie warunkach pomiarowych np. pomiaru widm z bardzo małych obszarów próbki (mikrospektrometria), ATR (osłabione odbicie wewnętrzne), widma refleksyjne pod dużymi kątami czy pomiary widm przy długich falach $10-100\text{ cm}^{-1}$ lub bardzo wysokiej rozdzielczości. W niektórych sytuacjach pomiarowych np. widma wysokiej rozdzielczości w dalekiej podczerwieni jest to jedyny możliwy sposób uzyskania zadawalających rezultatów. Spektroskopia SR FTIR w pełni pozwala wykorzystać technikę mikrospektrometrii pozwalającej otrzymywać chemiczny mapping próbek. Wybrane przykładowe obszary zastosowań:

1. Fizyka

- optyczne badania substancji w różnych warunkach fizycznych,
- przemiany fazowe ciał stałych,
- struktura i przemiany fazowe w ciekłych kryształach,
- badania międzywarstw metal/półprzewodnik, metal/tlenek metalu,
- tzw. płytkie domieszki w półprzewodnikach.

2. Inżynieria materiałowa

- uporządkowanie bliskiego zasięgu w materiałach krystalicznych i amorficznych,
- właściwości półprzewodników i nadprzewodników w warunkach ekstremalnych temperatur i ciśnień,
- mikrochemiczny skład materiałów wielofazowych np. mikroinkluzyje w polimerach i materiałach amorficznych,
- struktura i skład biomateriałów,
- skład i struktura powłok i cienkich filmów.

3. Biologia i biomedycyna

- badania biochemicznego składu pojedynczych komórek,
- analiza składu tkanek takich jak: włosy, skóra, kości,
- badania komórek nowotworowych.

4. Chemia

- identyfikacja molekuł w różnych warunkach i stanach,
- kataliza,
- petrochemia,
- procesy chemiczne w krótkich czasach.

5. Geologia i geochemia

- identyfikacja mikroobszarów i inkluzji w minerałach,
- struktura i skład granic międzyziarnowych,
- identyfikacja minerałów.

5.3.7 Linia U4: Krystalografia białek

Źródło: undulator		Zakres energii fotonów: 5 – 20 keV
Koordynatorzy: Mariusz Jaskólski (Uniwersytet im. Adama Mickiewicza) Krzysztof Lewiński (Uniwersytet Jagielloński)		

W wyniku dyskusji z kolegami reprezentującymi polskie środowisko biokrytalograficzne oraz z polskimi ekspertami pracującymi w ośrodkach zagranicznych, a także na podstawie własnych doświadczeń, przygotowaliśmy wstępną charakterystykę oczekiwań krytalografów białek w odniesieniu do planowanego w Polsce źródła promieniowania synchrotronowego.

1. Biorąc pod uwagę zainteresowanie biologią strukturalną w Polsce oraz dynamicznie rozwijające się ośrodki uprawiające krytalografią białek, w pełni uzasadnione jest przeznaczenie jednej linii pomiarowej wyłącznie do badań dyfrakcyjnych kryształów makromolekuł (PX, ang. skrót oznaczający krytalografię białek).
2. Eksperymenty dyfrakcyjne na kryształach białek stawiają wiązkom pomiarowym następujące wymagania (sprecyzowane poniżej): (1) jak najwyższa jasność (brilliance), tzn. maksymalna równoległość wiązki (rozbieżność pionowa i pozioma poniżej 0.5 mrad), (2) jak najwyższa intensywność strumienia fotonów (maximum flux density), (3) możliwość szybkiego i automatycznego dostrojenia energii w zakresie 5-20 keV, (4) wysoka stabilność geometryczna i energetyczna, (5) wąskie pasmo monochromatyczne, (6) robotyzacja i automatyzacja operacji wiązki.
3. Linia PX powinna oferować możliwość zautomatyzowanego dostrojenia energii, w jednostkach długości fali od 0.6 do 2.5 Å. Zakres ten wymagany jest przez eksperymenty dostrojonej dyfrakcji anomalnej MAD/SAD (ang., Multiwavelength Anomalous Diffraction/Single wavelength Anomalous Diffraction) przy krawędzi absorpcji K,L,M większości średnich i ciężkich pierwiastków, do uzyskania efektu rozpraszania anomalnego na siarce i fosforze (2.5 Å) oraz dla pomiarów z bardzo wysoką rozdzielczością (0.6 Å).
4. W powyższym zakresie źródło powinno zapewniać wysoki strumień fotonów ("intensywność") i jasność; szczególnie ważna jest mała rozbieżność kąтова. Maksimum intensywności powinno przypadać w zakresie 0.9-1.1 Å, gdzie przeprowadza się większość pomiarów dyfrakcyjnych i gdzie uszkodzenie radiacyjne nie stanowią jeszcze poważnego problemu.
5. Ze względu na niewielkie rozmiary próbki (10-200 μm) oraz wymaganą wysoką precyzję pomiarów kątowych, wymagana jest wysoka stabilność geometryczna (pionowa i pozioma) wiązki, ok. 5 μm w miejscu próbki (5 μm sfera "pomieszania", ang. sphere of confusion), tj. w centrum geometrycznym goniometru.
6. Pomiar MAD (*Multiwavelength Anomalous Diffraction*) wymaga wysokiej stabilności energetycznej wiązki, co najmniej 0.0001 Å.
7. Wysoce pożądana jest niezakłócona, powolna monotoniczna ewolucja czasowa strumienia fotonów. Z punktu widzenia pomiarów dyfrakcyjnych preferowany jest synchrotronowy pierścień akumulacyjny z ciągłym "nastrzykiem" (ang. top-up mode), czyli uzupełnieniem natężenia prądu cząstek elementarnych. Rozwiązanie takie stabilizuje optykę linii pomiarowych i nie zakłóca przebiegu pomiarów.

8. Generowanie promieniowania elektromagnetycznego dla linii PX powinno odbywać się w urządzeniu śródwiazkowym (ID, ang. insertion device) nowej generacji, o zminimalizowanym obciążeniu cieplnym (ang., low heat load). Powinien to być multipol magnetyczny typu undulator, najlepiej pracujący na pierwszej lub trzeciej harmonicznej, który pozwoli na zwiększenie strumienia fotonów i jasności o kilka rzędów wielkości w porównaniu np. z wiglerem.

9. Budowa linii pomiarowej jest bardzo kosztowną inwestycją. Nie istnieje w Polsce żadne środowisko naukowe, które mogłoby sprostać finansowo takiemu zadaniu. Dlatego budowa linii pomiarowych, w szczególności linii PX powinna być włączona do całkowitego kosztorysu budowy Centrum Promieniowania Synchrotronowego.

10. Końcową stacją pomiarową linii PX jest precyzyjny goniometr, na którym umieszczany jest badany kryształ (o wymiarach rzędu 10-200 μm), sprzężony z detektorem wiązek dyfrakcyjnych. Na nowoczesnych liniach PX stosuje się detektory powierzchniowe typu CCD. W centrum stacji końcowej, gdzie umieszczany jest badany kryształ, musi być łatwo dostępna duża przestrzeń robocza, gdyż montowane są tam dodatkowe urządzenia wspomagające, takie jak dysza przystawki niskotemperaturowej, ramię robota montującego kryształy, mikroskop sprzężony z kamerą CCD, oświetlenie kryształu, itp.

Dla przykładu załączamy parametry najlepszej obecnie synchrotronowej wiązki PX w USA (linia 19-ID synchrotronu APS w Argonne), pracującej na monochromatorze Si(111). Choć parametry te są prawdopodobnie nieosiągalne na planowanym źródle polskim, mogą stanowić użyteczne punkty odniesienia.

Parametry linii pomiarowej 19-ID synchrotronu APS w Argonne (USA) generującej promieniowanie synchrotronowe w undulatorze dla stacji doświadczalnej PX (krystalografia białek)

Parametr	Wartość
Energia fotonów	5–20 keV
Rozdzielczość energetyczna ($\Delta E/E$)	1.41×10^{-4}
Rozdzielczość energetyczna w warunkach rozstrojenia (de-tune) przy 10.4 keV	0.84 eV
Zawartość wyższych harmonicznych	< 0.036%
Częstość zmiany energii (przy 6.5 keV/20 keV)	350/3500 eV/s
Rozmiary ogniska	
W pionie (mm)	0.038
W poziomie (mm)	0.083
Maksymalna rozbieżność od źródła przy 12 keV	
Pionowa (mrad)	0.04
Pozioma (mrad)	0.08
Stabilność położenia wiązki w ognisku (mm)	< 0.010
Maksymalna odległość próbka-detektor (mm)	1200 (4500)
Strumień [z Si(111)], 1 ^o -harmoniczna ID przy 11.947 keV i 100 mA (fotonów/s)	1.3×10^{13}
Gęstość strumienia w ognisku przy idealnie zogniskowanej wiązce (fotonów/s.mm ²)	3.6×10^{15}
Efektywność wiązki (%)	80

(ŹRÓDŁO: ANDRZEJ JOACHIMIĄK, APS)

5.4 Linie pomiarowe – przewidywany rozwój

Ograniczenie liczby przewidywanych do uruchomienia w pierwszej kolejności (etap I) linii wynika przede wszystkim z możliwości technicznych równoczesnego prowadzenia prac konstrukcyjnych, czynności uruchamiania i procedur testowych. W grę wchodzi też czynniki finansowe. Niemniej jeśli chodzi o te ostatnie to już teraz zgłaszane są propozycje budowy 'własnych' linii eksperymentalnych przez duże projekty badawcze czy tworzone właśnie Centra Zaawansowanych Technologii. Dalej przedstawiamy konkretny projekt linii QEXAFS (oznaczonej roboczo jako U6/W6) zgłoszony przez program badawczy CENMIN w ramach CZT AKCENT.

Niewątpliwie ważną i godną jak najszybszej realizacji jest również linia **Linia diagnostyki medycznej i radioterapii** (oznaczona wstępnie symbolem **W5**).

Linia W5: Linia diagnostyki medycznej i radioterapii (koord.: J. Pełka (IF PAN)):

Typ, przeznaczenie linii:

Koronarografia, mammografia, bronchografia, dichromografia, metody radiograficzne 2D i 3D wykorzystujące kontrast fazowy/amplitudowy, radioterapia mikrowiązkowa.

Źródło – Wiggler o jak najszerszym zakresie dł. fali promieniowania (10keV – 150 keV) – niezbędny do uzyskiwania silnych wiązek i dostrajania energii fotonu do potrzeb radioterapii i diagnostyki. Umożliwi on wykorzystanie jednej linii do wielu technik badania żywych tkanek i organizmów w tym także ludzi oraz do diagnostyki i terapii.

Monochromator i optyka kształtująca wiązkę– złożone; pozwalające na pracę jednocześnie z dwiema wiązkami o różnej energii, na poszerzanie wiązki do rozmiarów rzędu 150 x 150 mm², lub na rozdzielenie wiązki na szereg mikrowiązek, zapewniające dyspersję $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-4}$.

Stacja pomiarowa

Zasadniczą częścią stacji będzie stanowisko do badania dużych obiektów (w tym człowieka) metodami prześwietlania i skanowania (wiązką lub obiektem) wyposażone w odpowiedni stół oraz fotel z możliwością wykonywania precyzyjnych translacji i obrotów. Konstrukcja stanowiska zapewnić musi standardy bezpieczeństwa właściwe dla zastosowań radiologii medycznej (dotyczących m. in. dawek i jonizacji) i będzie obejmowała właściwe systemy detekcji i blokady wiązki. System detektorów: podstawę będą stanowić dwa niezależne (lecz pracujące jednocześnie) niskoszumne detektory 2D (o rozdzielczości rzędu 6000 x 8000 px) o dużej powierzchni umożliwiające diagnostykę metodami dwuwiazkowymi, oraz detektory pomocnicze.

Jako dodatkowe wyposażenie potrzebne są: pomieszczenia do preparatyki wyposażone w konwencjonalne mikroskopy, mikrotomy i digestoria oraz pomieszczenie do przygotowania pacjentów.

Uzasadnienie potrzeby budowy synchrotronowej linii diagnostyczno-terapeutycznej – zwięzły opis metod i medycznych zastosowań promieniowania synchrotronowego.

Metody wykorzystujące promieniowanie synchrotronowe w zastosowaniach medycznych rozwijane są od trzydziestu lat w wielu różnych ośrodkach synchrotronowych na świecie. Silne

monochromatyczne wiązki promieniowania rentgenowskiego wytwarzane przez synchrotrony otworzyły nowe możliwości zarówno obrazowania żywych organizmów w celach diagnostycznych jak i w dziedzinie radioterapii [1]. Jedną z najwcześniej wprowadzonych metod diagnostyki synchrotronowej była angiografia, którą zastosowano klinicznie m.in. na synchrotronach w Hasylabie (Niemcy) [2] i w KEK (Japonia) [3]. Zastosowania medyczne promieniowania synchrotronowego wymagają nie tylko wiązek promieniowania o małej długości fali lecz również, w stosunku do badań podstawowych czy zagadnień biologii strukturalnej, o możliwie dużym natężeniu. Dla spełnienia tych wymagań wskazane są maszyny o energii wiązki elektronów co najmniej 2 GeV i możliwie dużym prądzie. Dodatkowo, by zwiększyć natężenie promieniowania, stosuje się jako źródła wigglerów, lub rzadziej, przestrajalne undulatory. Energia fotonów promieniowania rtg. dla medycznych zastosowań diagnostycznych i radiologii klinicznej zawiera się w zakresie 10-300 keV. Ludzkie ciało jest w zasadzie nieprzezroczyste dla fotonów o energii niższej od 10 keV. Typowe wartości energii fotonów w wybranych metodach radiologii klinicznej zebrano w tabeli 1.

Tabela 1. Typowe energie fotonów wykorzystywane w podstawowych zastosowaniach z zakresu radiologii klinicznej i radioterapii.

Zastosowanie	Energia fotonów rtg. (keV)	Uwagi
Mammografia	17-20	
Stomatologia	60-70	
Radiografia klatki piersiowej	50-70	
Radioterapia	30-300	Zależnie od kontrastu i podatności tkanki
Koronarografia	50 keV	z kontrastem Gd

W konwencjonalnej radiologii formowanie kontrastu obrazu ma swoje źródło w niejednorodnościach gęstości, składu lub grubości tkanek i opiera się wyłącznie na detekcji rozkładu natężeń spowodowanych różnicami współczynnika absorpcji obiektu dla promieni rentgenowskich. Głównym ograniczeniem jest tu niewielki kontrast słabo absorbujących szczegółów w miękkich tkankach. Wysokie natężenie, łatwość monochromatyzacji i wysoka spójność promieniowania wytwarzanego przez synchrotronowe źródła, zwłaszcza III generacji, stwarzają dla metod diagnostyki radiologicznej zupełnie nową jakość nieosiągalną za pomocą źródeł konwencjonalnych. Dotyczy to zarówno „klasycznych” metod z poprawionym dzięki własnościom promieniowania i monochromatyzacji kontrastem (np. metody oparte na wyborze dł. fali, jak mammografia i angiografia, zob. Rysunek 2), i zupełnie nowych technik, wykorzystujących kolimację i koherencję wiązki synchrotronowej do obrazowania różnic współczynnika refrakcji, analogicznych do różnych metod formowania kontrastu fazowego i amplitudowo-fazowego znanych z optyki klasycznej [1].

Poprawę kontrastu absorpcyjnego uzyskuje się przez staranne dobranie długości fali promieniowania do rodzaju środka kontrastującego (np. w angiografii). Opracowano też inne, ściśle synchrotronowe metody poprawy obrazu, jak np. dichromografię (po raz pierwszy zastosowaną w SSRL, USA do koronarografii, diagnozując pierwszych pacjentów już w 1986 r). Polega ona na jednoczesnym zastosowaniu dwu wiązek monochromatycznych o długościach fali tuż poniżej oraz tuż powyżej krawędzi absorpcji pierwiastka kontrastującego (zob. Rysunek 1). Diagnostyka metodą dichromografii prowadzona jest obecnie w kilku laboratoriach synchrotronowych. Pozwala ona zarejestrować bardzo małe różnice w gęstości pierwiastka kontrastującego, w przypadku jodu - typowo poniżej 1 mg/cm². Umożliwia jednocześnie ponad stukrotne obniżenie stężenia podawanego dożylnie kontrastu, co znacznie zmniejsza ryzyko

powikłań u pacjenta. Na synchrotronie w Hasylabie (Niemcy) dzięki systemowi NIKOS opartemu na tej metodzie, przebadano kilkuset pacjentów. W rezultacie wykazano wysoką rozdzielczość przestrzenną metody pozwalającą na uchwycenie zmian w naczyniach wieńcowych o średnicach aż do 0.6-0.8 mm, oraz na obrazowanie rezultatów wprowadzenia stentów i bypassów. Podobne urządzenia pracują również na synchrotronie w Tsukubie (Japonia), gdzie wykonuje się trójwymiarowe obrazowanie naczyń wieńcowych, oraz na linii medycznej w ESRF (Francja) do obrazowania pracy płuc. Bronchografię wykonuje się tu wykorzystując jako środek kontrastujący inhalowany przez pacjenta ksenon, co pozwala na obserwację oskrzelików o średnicach poniżej 1 mm.

Kontrast fazowy formuje się w wyniku przesunięć fazowych wytwarzanych przez obiekt w przechodzącej koherentnej wiązce rentgenowskiej. W zakresie energii fotonów 15-25 keV kontrast fazowy jest ponad tysiąc razy bardziej czuły na niewielkie różnice struktury i składu miękkich tkanek biologicznych w porównaniu do czułości metod absorpcyjnych. Dzięki temu można obserwować efekty fazowe nawet wówczas, gdy absorpcja jest pomijalnie mała [4]. W synchrotronowej diagnostyce radiologicznej stosuje się najczęściej trzy różne techniki wykorzystujące kontrast fazowy, zależnie od długości fali: radiografię kontrastu fazowego (PHC – Phase Contrast radiography), obrazowanie wzmocnione dyfrakcyjnie (DEI – Diffraction Enhanced Imaging) oraz interferometrię rentgenowską (XRI – X-Ray Interferometry). Metodę PHC stosowano z powodzeniem np. do obrazowania tkanki miękkiej piersi (mammografia) na synchrotronie ELETTRA (Włochy) uzyskując niezwykłą rozdzielczość i kontrast w porównaniu z metodami tradycyjnymi [5, 6]. Należy podkreślić, że synchrotronowa mammografia przy użyciu metod PHC i DEI pozwala uzyskać, oprócz wysokiej rozdzielczości przestrzennej i dużego kontrastu, także znaczące obniżenie zaabsorbowanej dawki promieniowania, szacowane nawet na 30-40% w stosunku do metod tradycyjnych.

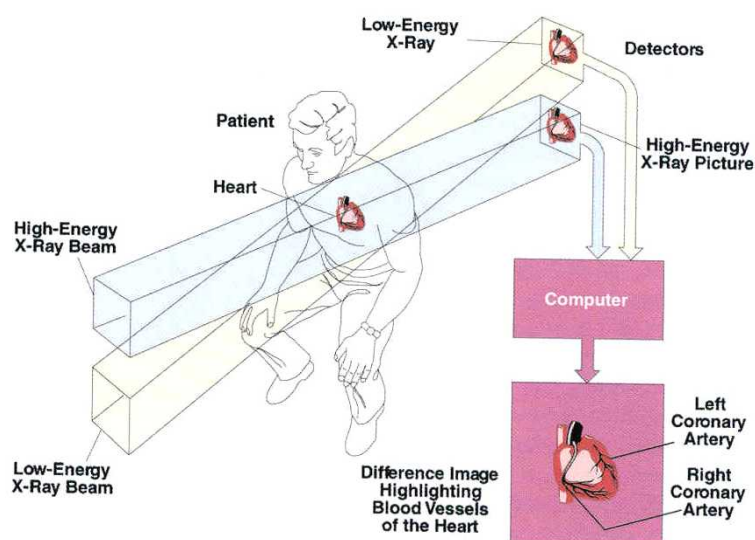
W radioterapii konwencjonalnej (przy użyciu lamp rentgenowskich lub źródeł jądrowych) naświetlanie guzów, przede wszystkim mózgu, jest szczególnie złożonym zagadnieniem. Stosowanie wysokich dawek promieniowania koniecznych dla zniszczenia guza jednocześnie skutkuje napromieniowaniem okolicznych zdrowych tkanek, co w konsekwencji doprowadzić może do zaburzeń neurologicznych, w krańcowych przypadkach narażając pacjenta na poważne inwalidztwo lub nawet śmierć. Celem poprawy skuteczności radioterapii i ograniczenia jej skutków ubocznych opracowano szereg metod, z których najważniejsze polegają na zastosowaniu środka kontrastującego, najczęściej jodu lub gadolinu, w odpowiednich związkach specyficznie łączących się ze zmienioną nowotworowo tkanką [7]. Wzrost efektywnej dawki terapeutycznej następuje wskutek zwiększonej absorpcji promieniowania w obrębie guza i silnym wzbudzeniu fotoelektronów, o niewielkim zasięgu, niszczących pobliskie komórki rakowe bez naruszania sąsiednich zdrowych tkanek [8].

Możliwość użycia monochromatycznego promieniowania rtg z synchrotronu, o długości fali dopasowanej do krawędzi absorpcji pierwiastka użytego w roli kontrastu, pozwala na znaczne obniżenie dawki przy niezmięniętej efektywności terapeutycznej. Prześtrajalność źródła synchrotronowego pozwala łatwo optymalizować energię fotonów ze względu na efekt fotoelektryczny. Prowadzi to do zniszczenia tkanki patologicznie zmienionej przy jednoczesnym wydatnym obniżeniu dawki absorbowanej przez okoliczne zdrowe tkanki. Niedawno wprowadzono nowe istotne modyfikacje do metod radioterapii z użyciem kontrastu wykorzystując odkryte 90 lat temu zjawisko wzrostu dawki progowej zniszczeń tkanki w miarę zmniejszania objętości napromieniowanej. Dzięki zastosowaniu mikrowiązek o rozmiarach kilku-kilkunastu mikrometrów można znacznie podwyższyć próg „odporności” tkanki na promieniowanie i dostarczyć bezpiecznie więcej fotonów do obszaru poddanego transformacji nowotworowej. Stosując jako kontrast związki platyny udaje się całkowicie zniszczyć guzy

mózgu u zwierząt doświadczalnych (m. in. szczurów, królików i świń) bez zauważalnych ubocznych objawów neurologicznych. Ostatnie doniesienia mówią o rozpoczęciu przygotowań do testów klinicznych tej metody na nieuleczalnie chorych ludziach.

Należy podkreślić, że wymienione wyżej metody synchrotronowe w przypadku niektórych postaci nowotworów, zwłaszcza mózgu (np. glejaka), są jedyną szansą skutecznej terapii. Analizy wskazują, że koszty leczenia przy zastosowaniu synchrotronu mogą być w wielu przypadkach znacząco niższe od kosztów terapii tradycyjnych. Przyczynia się to do olbrzymiego zainteresowania rozwojem stacji synchrotronowych do radioterapii i radiodiagnostyki. Do istniejących już w ośrodkach synchrotronowych m. in. w Brookhaven (USA), Spring-8 (Japonia), czy w ESRF (Grenoble) dołączą wkrótce nowo zaprojektowane dla narodowych źródeł synchrotronowych budowanych w Hiszpanii, Australii i Kanadzie. W zaawansowanym stadium znajduje się japoński projekt budowy średniej wielkości synchrotronu w całości przeznaczanego do celów medycznych. Rozwijane są równolegle, zwłaszcza w Japonii, projekty studialne tzw. synchrotronów kompaktowych służących do radiodiagnozy i radioterapii, a przeznaczonych do instalacji w większych szpitalach.

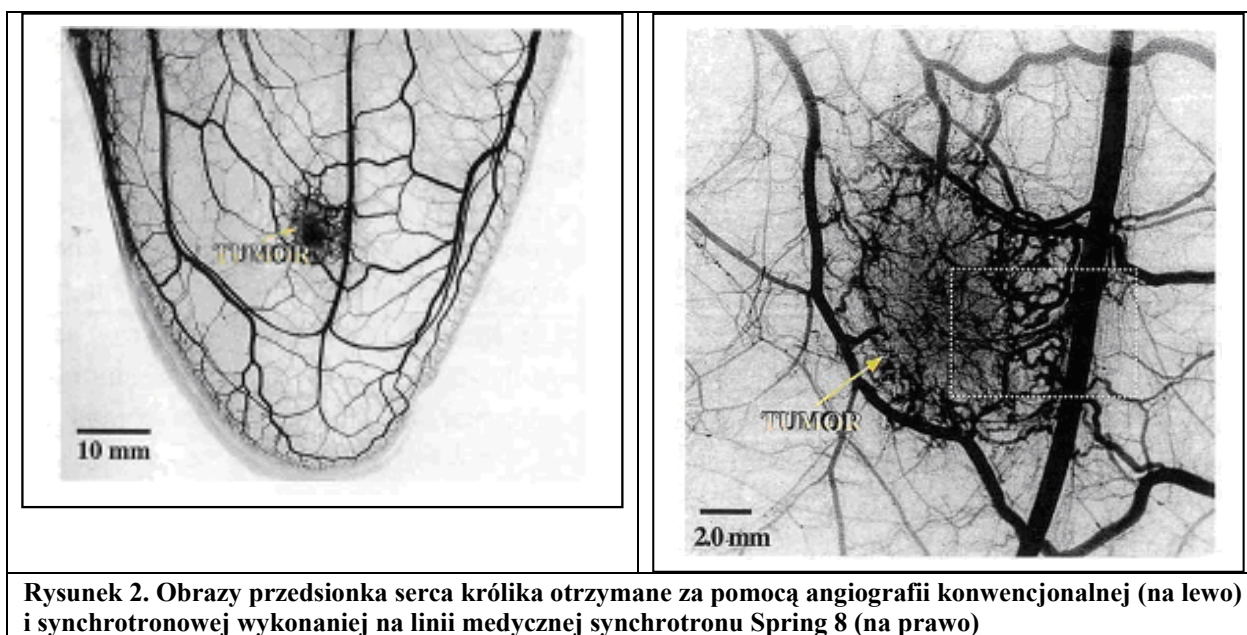
Nie sposób tu wymienić wszystkich zastosowań synchrotronu do diagnostyki i terapii medycznej. Warto jednak wspomnieć także o znaczeniu źródła synchrotronowego do prowadzenia podstawowych badań medycznych, nie związanych bezpośrednio z leczeniem. Możliwość obrazowania żywych tkanek z dużą rozdzielczością czasową i przestrzenną przy stosunkowo niewielkich dawkach promieniowania pozwala badać procesy fizjologiczne, których nie udaje się uchwycić innymi metodami. Ciekawym przykładem jest np. projekt badawczy dotyczący anatomii i fizjologii narządu słuchu (na synchrotronie SSRL, USA). Ludzkie ucho zawiera precyzyjnie „dostrojony” delikatny układ miękkich tkanek i kości służący do przekazania energii akustycznej z otoczenia do płynu wypełniającego ucho wewnętrzne. Kostki słuchowe są najmniejszymi kośćmi w ludzkim organizmie i stosunkowo często podlegają różnym procesom patologicznym powodującym dysfunkcje słuchu. Promieniowanie synchrotronowe umożliwia szczegółowe badanie morfologii i dynamiki tkanek narządu słuchu anatomicznie prawidłowego i patologicznie zmienionego. Dzięki temu uzyskuje się pogłębioną wiedzę dotyczącą jego fizjologii. Innym przykładem są badania osteoporozy kości prowadzone w wielu ośrodkach synchrotronowych (w tym także przez badaczy z Polski w Brookhaven, ESRF i Hasylabie).



Rysunek 1 Schemat badania angiografii dichromatycznej (wiązka CANDLE, ~33 keV)

<http://www.candle.am/medical.htm>

W powiązaniu z postępującym starzeniem się populacji i faktem, iż znaczna część osób starszych cierpi na różne formy ubytków słuchu, czy osłabienia układu kostnego na skutek osteoporozy znaczenie takich badań jest oczywiste. Zainteresowanie budową i eksploatacją proponowanej linii synchrotronowej w środowisku lekarzy potwierdziły konsultacje i rozmowy przeprowadzone przez autora projektu.



Rysunek 2. Obrazy przedsiionka serca królika otrzymane za pomocą angiografii konwencjonalnej (na lewo) i synchrotronowej wykonanej na linii medycznej synchrotronu Spring 8 (na prawo)

- [1] Reto Meuli, Yeukuang Hwu, Jung Ho Je, Giorgio Margaritondo; 'Synchrotron radiation in radiology: radiology techniques based on synchrotron sources'; Eur Radiol (2004) 14:1550–1560
- [2] Dix. W-R: 'Intravenous coronary angiography with synchrotron radiation', Prog. Biophys. Molec. Biol. 63, 159(1995).
- [3] Y. Sugishita, S.Otsuka, Y. Itai, T. Kakeda, M. Ando and K. Hyodo: 'Synchrotron radiation coronary angiography and its application', Abstracts of 10th. meeting of the Jap. Soc. for Synchrotron Radiation. Research, pp.1,(1997)
- [4] Tohoru Takeda: 'Phase-contrast and fluorescent X-ray imaging for biomedical researches'; Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 548 (2005) 38–46
- [5] A. Abrami, F. Arfelli, R.C. Barroso, A. Bergamaschi, F. Bille, P. Bregant, F. Brizzi, K. Casarin, E. Castelli, V. Chenda, L. Dalla Palma, D. Dreossi, C. Fava, R. Longo, L. Mancini, R.-H. Menk, F. Montanari, A. Olivo, S. Pani, A. Pillon, E. Quai, S. Ren Kaiser, L. Rigon, T. Rokvic, M. Tonutti, G. Tromba, A. Vascotto, C. Venanzi, F. Zanconati, A. Zanetti, F. Zanini; 'Medical applications of synchrotron radiation at the SYRMEP beamline of ELETTRA'; Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 548 (2005) 221–227
- [6] C. Venanzi, A. Bergamaschi, F. Bruni, D. Dreossi, R. Longo, A. Olivo, S. Pani, E. Castelli; 'A digital detector for breast computed tomography at the SYRMEP beamline'; Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 548 (2005) 264–268
- [7] Norman A, Ingram M, Skillen RG, Freshwater DB, Iwamoto KS, Solberg T.; 'X-Ray Phototherapy for canine brain masses', Radiation Oncology Investigations 5 (1997) 8-14.
- [8] Rose HT, Norman A, Ingram M, Aoki C, Solberg TD, Mesa A.; 'First radiotherapy of Human metastatic brain tumors delivered by a computerized tomography scanner (CTRx)'; Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys. 45 (1999) 1127-1132

Linia U6/W6: Linia QEXAFS (koord.: Cz. Kapusta (WFIS, AGH)):

Typ, przeznaczenie linii:

Szybka spektroskopia absorpcji twardego promieniowania X, spektroskopia emisji promieniowania X, rezonansowe nieelastyczne rozpraszanie promieniowania X, dichroizm

Zakres energii

2 – 21 keV

Element generujący promieniowanie

Hybrydowy undulator o krótkim okresie (20mm dla synchrotronu o energii cząstek 3GeV) i stożkową przerwę (tapered), wykorzystanie 1, 3, 5 i 7 harmonicznej, lub wiggler o energii krytycznej widma rzędu 8-10keV.

Charakterystyka stacji pomiarowej

Stacja pomiarowa przeznaczona do szybkiej lub/i wysokorozdzielczej spektroskopii absorpcji i emisji twardego promieniowania X (XAS – ang. *X-ray Absorption Spectroscopy*, XES – ang. *X-ray Emission Spectroscopy*, XANES – ang. *X-ray Absorption Near Edge Structure*, EXAFS – ang. *Extended X-ray Absorption Fine Structure*). Wysokie natężenie promieniowania generowanego przez „urządzenie wstawiane” w połączeniu z trybem skanowania „w locie” (ang. *continues scan*), o szybkości detekcji rzędu 200 μs /punkt, pozwoli na pomiar pełnego widma EXAFS w czasie poniżej jednej sekundy. Planowany, użyteczny zakres energii umożliwi badanie krawędzi K pierwiastków o liczbie atomowej od 15 (fosfor) do 42 (molibden) oraz krawędzi L pierwiastków o liczbie atomowej od 39 (itr) do 92 (uran).

Badania absorpcji wykonywane będą w modzie transmisji, w modzie detekcji całkowitego uzysku elektronów oraz w modzie fluorescencji z zastosowaniem wieloelementowego detektora półprzewodnikowego (Si lub Ge) lub wysokorozdzielczego ($dE/E \sim 10^{-4}$) spektrometru optycznego emisji promieniowania X (fluorescencji) w geometrii Rowlanda bądź przy użyciu techniki dyspersyjnej. Możliwe będą również badania dichroizmu liniowego oraz kołowego, z użyciem płytek ćwierćfalowych do generacji polaryzacji kołowej.

Wysokie natężenie promieniowania w połączeniu z wysokorozdzielczym detektorem emisji promieniowania X pozwoli na przeprowadzanie pomiarów techniką rezonansowego nieelastycznego rozpraszania promieniowania X (RIXS – ang. *Resonant Inelastic X-ray Scattering*).

Stacja pomiarowa wyposażona będzie w kriostat i piec, które umożliwią eksperymenty w zakresie temperatur od 3 do 1200K, oraz magnes nadprzewodzący generujący pole magnetyczne $\sim 100\text{kOe}$. Zastosowanie systemu zwierciadeł ogniskujących w geometrii Kirpatrick-Baez, pozwoli na badania typu micro-XAS jak również na pomiary w wysokich ciśnieniach z zastosowaniem kowadeł diamentowych (ang. *Diamond Anvil Cell*).

Możliwości zastosowań

Spektroskopia absorpcji promieniowania X jest selektywną techniką pomiarową, umożliwiającą określenie lokalnego uporządkowania atomów wokół wybranego pierwiastka związku. Badania te są nieniszczące i możliwe niezależnie od stanu skupienia materii, co powoduje, że technika ta znajduje zastosowanie w wielu dziedzinach nauki, jak np. w naukach materiałowych, chemii, biochemii, fizyce, biofizyce, fizykochemii, geologii, mineralogii, archeologii itd. Szybka spektroskopia absorpcji jest stosowana głównie w badaniach z zakresu chemii nieorganicznej, a w szczególności w badaniach przebiegu reakcji. Spektroskopia w pobliżu krawędzi absorpcji, wysokorozdzielcza spektroskopia emisji oraz ich połączenie, czyli rezonansowe nieelastyczne rozpraszanie promieniowania X stosowane są do selektywnego

badania struktury elektronowej. Umożliwiają ilościowe określenie stopnia utlenienia wybranych pierwiastków badanej materii jak również ich konfiguracji elektronowej (stanu spinowego).

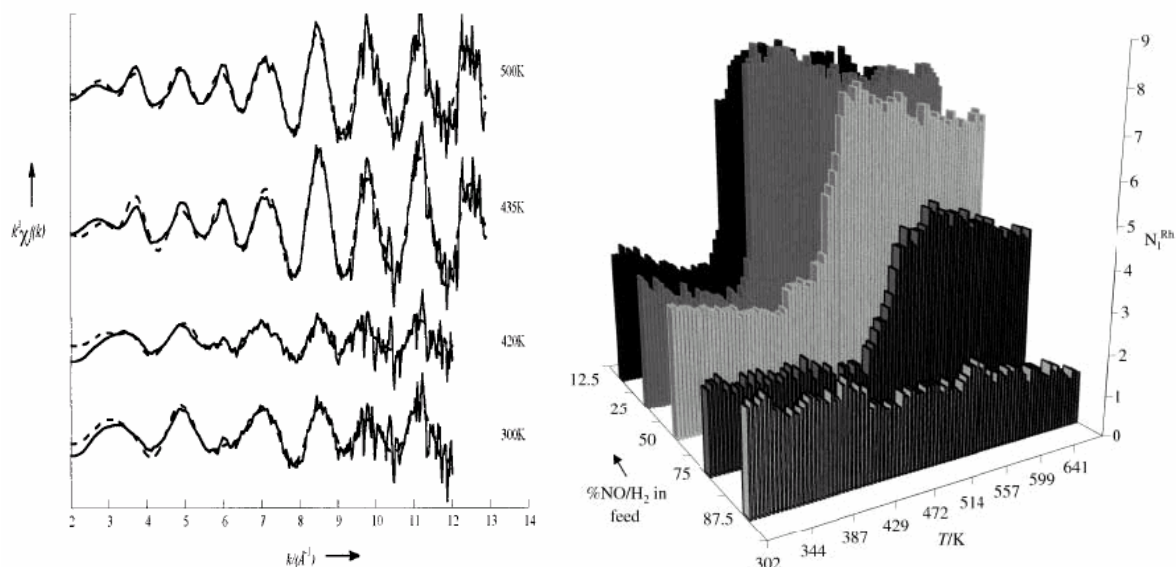
Detekcja widm EXAFS przy użyciu spektrometru emisji pozwala na badanie lokalnego uporządkowania wokół atomów o określonej konfiguracji elektronowej - selektywność ze względu na stopień utlenienia i/lub stan spinowy (ang. *site selective EXAFS*). Dodatkowo, wykonując pomiary na próbkach zorientowanych strukturalnie lub magnetycznie z użyciem polaryzacji promieniowania (liniowej lub kołowej), możliwe jest badanie anizotropii rozkładu ładunków oraz cząstkowych momentów magnetycznych. Podkreślić należy, że przy użyciu twardego promieniowania X główne informacje uzyskuje się z wnętrza próbek, w przeciwieństwie do większości konwencjonalnych technik spektroskopowych.

Przykładowe wyniki

Poniżej przedstawione są przykłady badań wykonanych przy użyciu wyżej opisanych technik badawczych, które mogłyby być uzyskane na planowanej stacji pomiarowej.

1. Reakcja katalizy NO w warstwach rodu (szybki EXAFS)

W prezentowanych badaniach studiowano przebieg reakcji katalitycznej w symulowanych warunkach rzeczywistych (ang. *operando EXAFS*). W trakcie procesu ogrzewania katalizatora z prędkością kilkudziesięciu stopni na minutę (typowej dla silników spalinowych) wykonane zostały szybkie pomiary widm EXAFS (lewy rysunek), które posłużyły do wyznaczenia liczby koordynacyjnej atomów Rh. Gwałtowny wzrost tego parametru (pokazany na prawym rysunku) w funkcji temperatury i stężenia NO pozwolił określić optymalne warunki pracy takiego katalizatora. Badania te są częścią szerokiego programu mającego doprowadzić do zastąpienia kosztownych i trudnych w użyciu katalizatorów z warstwami platyny przez tańsze i „łatwiejsze” technologicznie odpowiedniki.

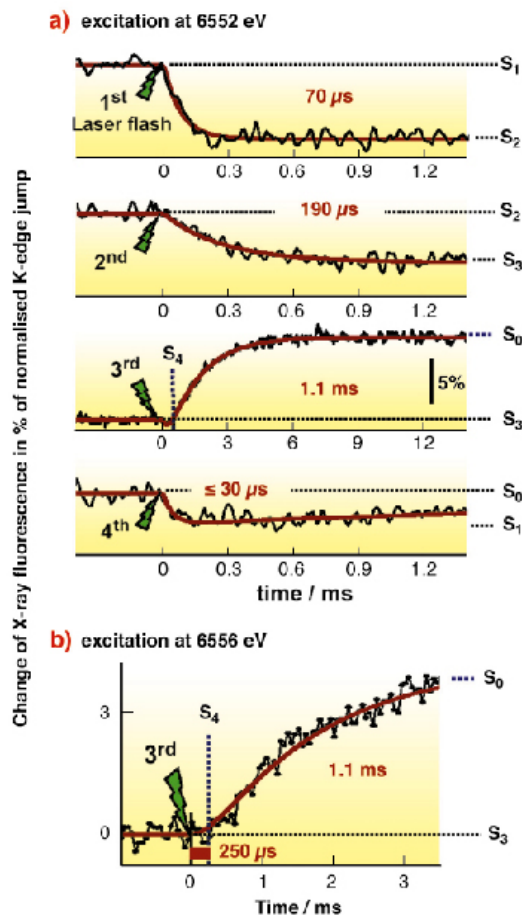


Źródło: M.A.Newton et al., *Angewandte Chemie, International Edition in English* **41**, 2587 (2002).

2. Przebieg reakcji fotosyntezy (czasowo rozdzielczy XAS)

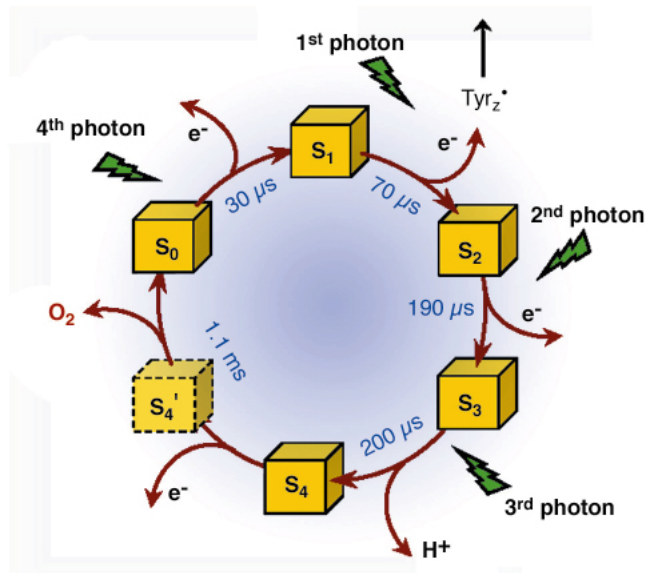
Kolejny przykład przedstawia badania przebiegu czasowego procesu absorpcji twardego promieniowania X z rozdzielczością mikrosekundową. Badano zmiany natężenia transmitowanego promieniowania o charakterystycznych energiach dla widm EXAFS molekuł tlenku manganu o różnej stechiometrii wywołane przez kolejne impulsy laserowe (lewy

rysunek). Pozwoliło to na zaobserwowanie nieznanego dotychczas kroku w reakcji fotosyntezy, który polega na utworzeniu metastabilnej molekuly MnO_2 na okres rzędu $250\mu s$ (krok S_4 w poniższym schemacie). Zrozumienie i umiejętność odtworzenia procesu fotosyntezy prowadzące do uzyskania kontroli nad tym najwydajniejszym ze znanych procesów tworzenia i magazynowania energii pozwoli rozwiązać problem wyczerpujących się zasobów energetycznych i odsunąć znacząco w czasie widmo globalnego kryzysu energetycznego.



Źródło: M. Haumann et al., Science **310**, 1019 (2005).

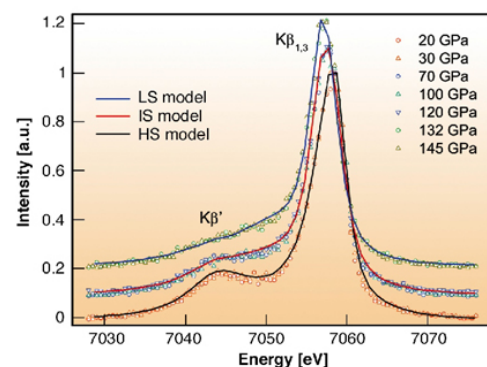
3. Zmiany konfiguracji elektronowej perowskitu pod wpływem wysokiego ciśnienia (spektroskopia emisji



promieniowania X)

Przykład zastosowania kowadeł diamentowych w badaniach emisji promieniowania X. Rysunek przedstawia zmianę kształtu linii fluorescencyjnej $K\beta$ żelaza ($3p \rightarrow 1s$) w próbce $(Mg_{0.9}Fe_{0.1})SiO_3$, głównego składnika tzw. dolnego płaszcza skorupy ziemskiej (ang. Lower Mantle), pod wpływem ciśnienia hydrostatycznego. Brak pików satelitarnego $K\beta'$ dowodzi, że w warunkach rzeczywistych jony żelaza mają konfiguracje o wysoko-spinowej (ang. *high spin*). Badanie własności materiałów budujących skorupę ziemską w warunkach ich występowania jest niezbędne dla pełnego zrozumienia procesów geologicznych zachodzących we wnętrzu Ziemi.

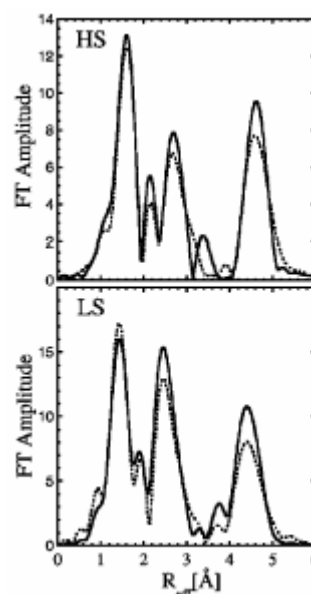
Źródło: J. Badro et al., Science **305**, 383 (2004); Science **300**, 789 (2003).



4. Badanie lokalnego uporządkowania wokół jonów żelaza o różnej konfiguracji spinowej w błękitie pruskim (selektywny EXAFS)

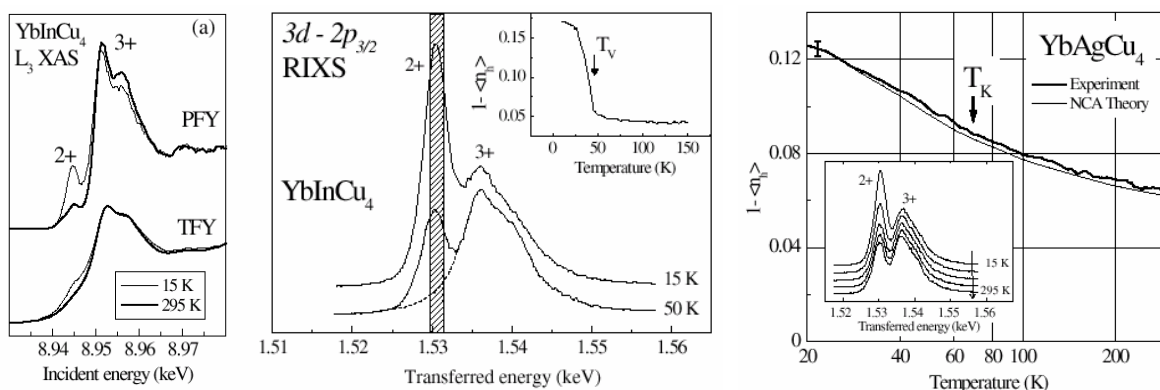
Przykład ten prezentuje możliwości, jakie daje zastosowanie wysokorozdzielczego spektrometru emisji promieniowania X do detekcji widm absorpcyjnych. Widma fluorescencyjne EXAFS, otrzymane przez detekcję natężenia linii emisyjnej K_{β} żelaza (patrz poprzedni przykład), zawiera informacje o otoczeniu lokalnym jonów w konfiguracji wysoko-spinowej (górny rysunek), w przeciwieństwie do widm mierzonych przy użyciu linii głównej K_{β} , która zawiera uśrednioną informację o otoczeniach wszystkich jonów żelaza w $(Fe_4[Fe(CN)_6]_3)$, z której można uzyskać informacje o otoczeniu jonów w konfiguracji nisko-spinowej (dolny rysunek). W ten sposób możliwe jest selektywne badanie lokalnego otoczenia jonów o różnej konfiguracji elektronowej (konfiguracji spinowej, stopniu utlenienia), co pozwala na lepsze zrozumienie procesów funkcjonalnych różnych jonów w strukturze związków molekularnych.

Źródło: P. Glatzel et al., *Inorganic Chemistry* **41**, 3121 (2002).



5. Spektroskopia absorpcji wysokiej rozdzielczości i rezonansowe nieelastyczne rozpraszanie promieniowania X (RIXS) w badaniu struktury elektronowej związków z grupy tzw. ciężkich fermionów

Ostatni przykład pokazuje możliwości, jakie daje detekcja widm w pobliżu krawędzi absorpcji przy użyciu wysokorozdzielczego spektrometru emisji. Badane w ten sposób widma absorpcyjne (widma PFY na lewym rysunku) charakteryzują się znacznie mniejszym poszerzeniem energetycznym związanym z dłuższym czasem charakterystycznym procesu emisji. Dzięki tej metodzie możliwa staje się ilościowa analiza struktury elektronowej wybranego pierwiastka związku. W prezentowanym przypadku zaobserwowano zmianę stopnia utlenienia jonów iterbu w temperaturze strukturalnego przejścia fazowego (rysunek środkowy) w związku $YbInCu_4$. W analogicznym związku ze złotem zmiana ta jest stopniowa, co dodatkowo potwierdziły badania rezonansowego nieelastycznego rozpraszania promieniowania X (prawy rysunek). Dzięki tym badaniom udało się potwierdzić słuszność teoretycznego modelu Andersona w opisie struktury elektronowej badanych związków, a tym samym rozwiązać wieloletnią kontrowersję w zakresie fizyki materii skondensowanej.



Źródło: C. Dallera et al., *Physical Review Letters* **88**, 196403 (2002).

6 Strona organizacyjna przedsięwzięcia

Prace przygotowawcze prowadzi utworzona przez Uniwersytet Jagielloński spółka prawna Centrum Promieniowania Synchrotronowego Sp. z o.o. co nie przesądza oczywiście o przyszłej formie prawno-organizacyjnej Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego. Na obecnym etapie daje to możliwość sprawnego i efektywnego działania. Wymagane są następujące działania:

- przygotowanie założeń do projektu,
- współpraca z MNiSzW w celu zapewnienia finansowania i wyboru formy prawnej organizacji prowadzącej budowę i administrującej obiekt,
- przygotowanie projektu wstępnego – decyzje dot. szczegółowych rozwiązań technicznych,
- doprowadzenie do powstania studium wykonalności,
- przygotowanie warunków administracyjnych (tzw. uzgodnienia, etc.),
- pozyskanie i szkolenie wysoko wykwalifikowanej *manpower*,
- działalność informacyjna i *PR*,
- partnerstwo krajów Europy Środkowo –Wschodniej – powołanie komitetu stanowiącego forum współpracy .

6.1 Możliwe formy organizacyjne na poszczególnych etapach realizacji projektu

Określenie optymalnej z punktu widzenia efektywności zarządzania i dostępności funduszy formy organizacyjnej (zarówno w okresie budowy jak i eksploatacji) stanowić będzie przedmiot analiz i ekspertyz prowadzonych w fazie przygotowawczej przez Centrum Promieniowania Synchrotronowego Sp. z o.o. Działania te będą prowadzone w ścisłej współpracy z Ministerstwem Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

6.2 Wykorzystanie potencjału polskiego przemysłu

Wstępny wykaz polskich firm usługowych i produkcyjnych, posiadających potencjał i doświadczenie wystarczające do podjęcia się budowy hali synchrotronu i jej wyposażenia w ramach Centrum Promieniowania Synchrotronowego w Polsce.

1. Przygotowanie prac uzbrojeniowych terenu pod budowę hali synchrotronu wraz z budową hali synchrotronu

+ <http://dmoz.org/World/Polska/Biznes/Budownictwo/Przemys%C5%82owe/>

Spis zawiera dane 93 firm zlokalizowanych w Polsce. Część firm posiada wystarczające doświadczenie i zasoby do wykonania hali synchrotronu.

Przykładowe dane:

- Instal Białystok S.A. ul. E. Orzeszkowej 32, 15-084 Białystok,
[zatrudnienie 300 osób, obroty 93 mln zł. – dane z 2005r.]
<http://www.instal.bialystok.pl/>
- ABM SOLID S.A., ul. Słoneczna 30, 33-100 Tarnów,
<http://www.abmsolid.com.pl>

- INSTAL KRAKÓW Spółka Akcyjna, ul. Konstantego Brandla 1, 30-732 Kraków
<http://instalkrakow.pl>

2. Budowa stacji energetycznych niskiego napięcia

+ <http://dmoz.org/World/Polska/Biznes/Energia/Elektroenergetyka/>

Spis zawiera dane 73 firm zlokalizowanych w Polsce. Część firm posiada wystarczające doświadczenie i zasoby do wykonania stacji energetycznych niskiego napięcia służących do zasilania synchrotronu jak również budynku i laboratoriów.

Przykładowe dane:

- ZPUE S.A. Włoszczowa <http://www.zpue.com.pl>
- ZAKŁAD WYKONAWSTWA SIECI ELEKTRYCZNYCH KRAKÓW S.A.
<http://www.zwse.com.pl>

3. Instalacje niskiego napięcia

- <http://www.yellowpages.pl/AF/instalacje%20niskiego%20napi%C4%99cia.html>

4. System klimatyzacji i wentylacji, układy schładzające wodę, sprężone powietrze itp.

- +http://dmoz.org/World/Polska/Biznes/Budownictwo/Instalacje/Klimatyzacja_i_82odnictwo/

Spis zawiera dane 111 firm zlokalizowanych w Polsce. Część firm posiada wystarczające doświadczenie i zasoby do wykonania klimatyzacji i wentylacji całego budynku jak również instalacji wody lodowej służącej do schładzania komponentów synchrotronu wymagających takiego schładzania.

5. Oprzyrządowanie próżniowe - systemy wytwarzające próżnię i układy kontrolno-pomiarowe

- Jedyne firma TEPRO S.A. jest polskim producentem mechanicznych pomp próżniowych przystosowanych do wytwarzania próżni wstępnej, jednakże zakres produkowanych pomp nie wystarcza do realizacji przedsięwzięcia. Pozostałe firmy zajmujące się techniką próżniową sprzedają na rynku polskim pełną gamę pomp próżniowych producentów takich jak: Leybold Vacuum, GammaVacuum, Pfeiffer Vacuum, Varian, Alcatel, Busch i inne.

- PREVAC Sp. z o.o., ul. Raciborska 61, 44-362 Rogów

<http://www.prevac.pl>

Firma PREVAC będąc producentem systemów próżniowych posiada odpowiednie doświadczenie i zaplecze projektowo techniczne do zrealizowania układów rur przystosowanych do ultra wysokiej próżni i zaopatrzenia go w pompy próżniowe dostosowane do aplikacji.

- Softrade Sp. z o.o. ul. Grunwaldzka 391, 60-173 Poznań

<http://www.softrade.com.pl/>

- Przemysłowy Instytut Elektroniki, ul. Długa 44/50, 00-241 Warszawa

<http://www.pie.edu.pl/>

6. Systemy sterowania wraz z oprogramowaniem

Spis firm zajmujących się przemysłowymi systemami sterowania opartymi na sterownikach programowalnych np. SIMATIC firmy Siemens. Spis obejmuje 20 firm przy czym na stronach www można ich znaleźć więcej: <http://www.gdnet.pl/strona/systemy~sterowania/3466/>

7. Akcelerator – zasilacze wysokiej częstotliwości i dużej mocy

Zakłady Elektronowe Lamina S.A. , Pulawska 34, 05-500 Piaseczno koło Warszawy
[własność: Skarb Państwa] www.lamina.com.pl

8. Pierścienie magazynujące

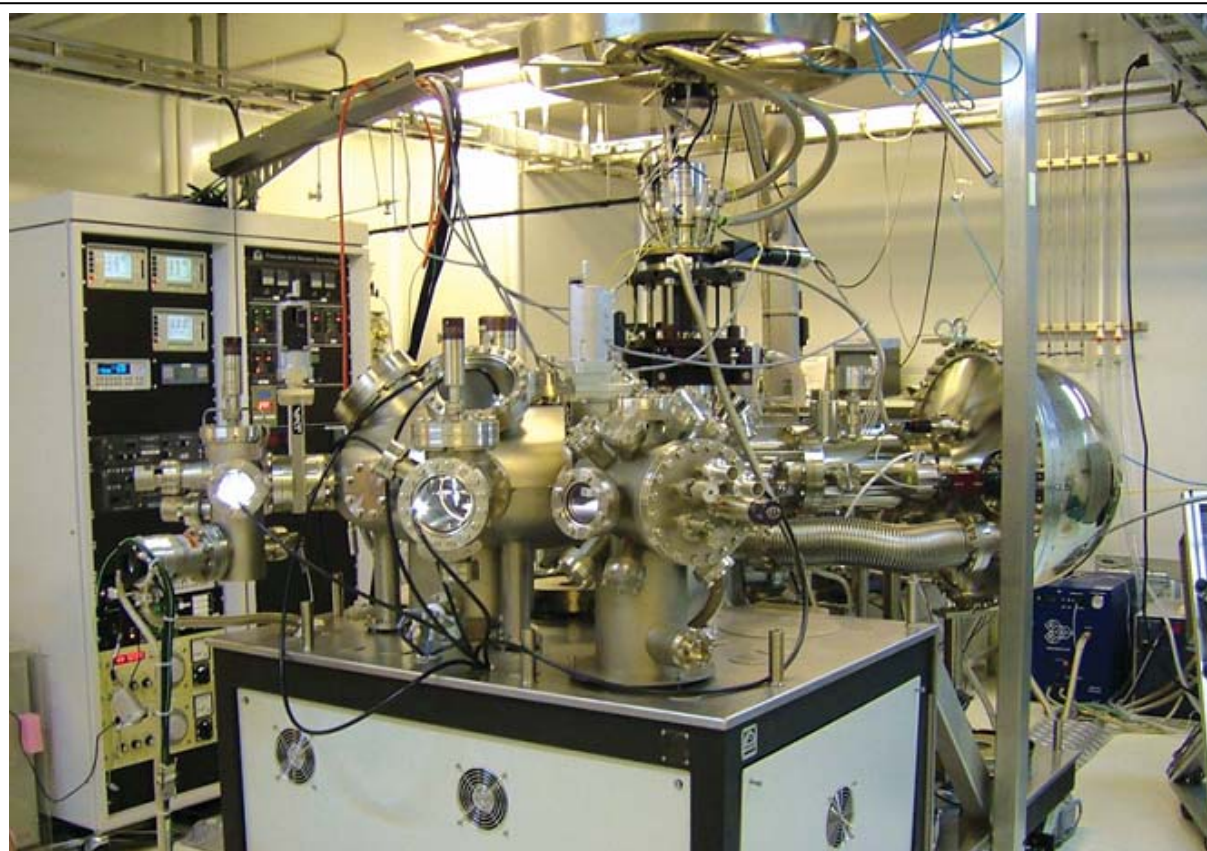
- PREVAC Sp. z o.o., ul. Raciborska 61, 44-362 Rogów
<http://www.prevac.pl>

Firma PREVAC będąc producentem systemów próżniowych posiada odpowiednie doświadczenie i zaplecze projektowo techniczne do zrealizowania orurowania przystosowanego do ultra wysokiej próżni i zaopatrzenia w pompy próżniowe dostosowane do potrzeb.

9. Stacje robocze

- PREVAC Sp. z o.o., ul. Raciborska 61, 44-362 Rogów <http://www.prevac.pl>

Firma PREVAC będąc producentem systemów próżniowych zajmuje się projektowaniem i produkcją systemów ultra wysokiej próżni umożliwiających badanie fizyko-chemicznych własności ciał stałych, w tym również *end-station* do aplikacji synchrotronowych.



Wielozadaniowa stacja pomiarowa do współpracy z nowym synchrotronem w Australii (Melbourne, Victoria). Stacja zbudowana została przez firmę PREVAC i obecnie jest testowana na Tajwanie.

6.3 Wkład polskich naukowców i techników obecnie pracujących za granicą

Z prowadzonych rozmów wynika, że wszyscy polacy pracujący (zajmujący często wysokie stanowiska naukowe i techniczne) przy synchrotronach na świecie są gotowi do dużego zaangażowania i wszechstronnej pomocy. Dotyczy to co najmniej kilkunastu osób związanych z takimi synchrotronami jak ESRF, HASYLAB, APS, ALS, CLS, Singapur i in.

6.4 Pomoc ze strony ośrodków zagranicznych

Możemy liczyć na daleko idącą pomoc merytoryczą, doradztwo organizacyjne i działalność szkoleniową ze strony wielu czołowych ośrodków synchrotronowych (np. BESSY II, DESY/HASYLAB, DIAMOND, ELETTRA, CLS, ALS, APS).

7 Proponowana lokalizacja

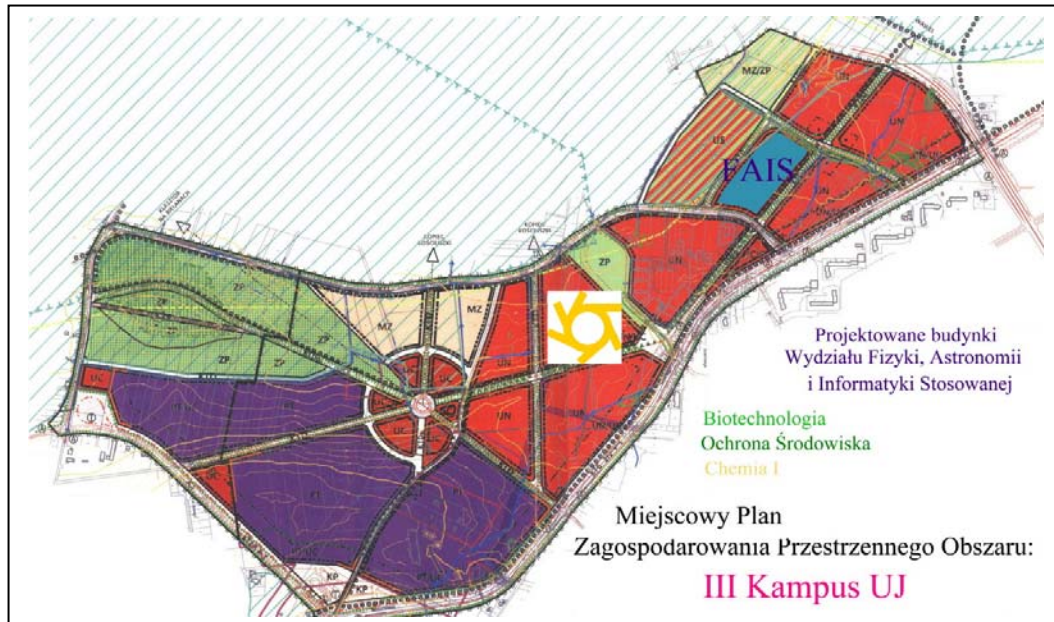
Czynniki, które należy wziąć pod uwagę jako zasadnicze elementy decyzji o wyborze lokalizacji budowy to:

- istnienie planu zagospodarowania przestrzennego,
- powiązanie z silnym środowiskiem naukowo-dydaktycznym,
- sprzyjające warunki geologiczno-terenowe,
- odpowiedni powierzchniowo obszar i jego przygotowanie infrastrukturalne (w szczególności w aspekcie mocy linii energetycznej - ok. 3 - 5 MW),
- możliwości organizacyjno-administracyjne i finansowe jednostki koordynującej,
- przychyłność lokalnych władz samorządowych (ta wymierna),
- usytuowanie względem pozalokalnych (w tym pozakrajowych) potencjalnych użytkowników,
- stopień rozwoju powiązań komunikacyjnych (czyli po prostu łatwość dojazdu),
- zaplecze socjalno-hotelowe.

Po dyskusji w środowisku użytkowników promieniownia synchrotronowego proponujemy lokalizację na terenie III Kampusu UJ w Krakowie. Lokalizacja ta w następujący sposób spełnia wymienione wyżej wymagania:

- Ośrodek akademicki i naukowy - wszystkie dziedziny potencjalnie zainteresowane wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego,
- sprzyjające warunki geologiczno-terenowe,
- odpowiedni powierzchniowo obszar (ok. 6 ha) i jego przygotowanie infrastrukturalne (w szczególności w aspekcie mocy linii energetycznej - ok. 2.5 - 3 MW, sąsiedztwo elektrowni w Skawinie),
- możliwości organizacyjno-administracyjne i finansowe jednostki koordynującej - Uniwersytetu Jagiellońskiego - obecnie 100 % udziałowca CPS Sp. z o. o.,
- przychyłność lokalnych władz samorządowych (także wymierna - np. w zakresie dróg i infrastruktury),

- usytuowanie względem pozalokalnych potencjalnych użytkowników (w tym pozakrajowych: Węgry, Słowacja, Czechy, Austria),
- stopień rozwoju powiązań komunikacyjnych (czyli po prostu łatwość dojazdu: połączenia autostradowe, lotnicze, kolejowe; autostrada w odległości 3 km, lotnisko Balice w odległości 6 km),
- zaplecze socjalno-hotelowe.



8 Przewidywane koszty

Na całkowity koszt inwestycji składają się koszty związane z

- budynkiem synchrotronu
- synchrotronem
- liniami eksperymentalnymi.

A. Koszt budynku

Koszty realizacji budynku synchrotronu oszacowane zostały w oparciu o rozporządzenie Ministra Infrastruktury z dnia 18 maja 2004 roku w sprawie określenia metod i podstaw sporządzania kosztorysu inwestorskiego.

Koszty realizacji zadania wyliczono jako sumę kosztów prac przygotowawczych, prac projektowych robót budowlanych, wyposażenia podstawowego (bez urządzeń i aparatury naukowo-badawczej) oraz nadzoru i kontroli. Przyjęte zostało, że hala synchrotronu będzie miała kształt pierścienia o promieniu zewnętrznym 45 metrów i promieniu wewnętrznym 15 metrów i będzie miała powierzchnię użytkową 6500 m². Dodatkowo budynek powinien posiadać pomieszczenia związane z obsługą techniczną budynku, pomieszczenia dla pracowników obsługi, pomieszczenia warsztatowo-magazynowe i pomieszczenia administracyjne, które w sumie będą posiadały powierzchnię użytkową 700 m².

Prace przygotowawcze obejmują:

- prace studialne
- badania i usługi
- opracowanie programu funkcjonalno – użytkowego i założeń technologicznych
- konkurs i opracowania po konkursie
- obsługę przetargów

W ramach prac projektowych wykonane zostaną projekty budowlane i wykonawcze wszystkich branż wraz z nadzorem autorskim.

W pozycji roboty budowlane mieszczą się prace budowlano – montażowe, wykończeniowe i podstawowe wyposażenie wnętrz.

Nadzór i kontrola jakości zawiera

- weryfikację projektów
- nadzór inwestorski
- certyfikację budowlaną obiektu

Tej rangi obiekt winien posiadać międzynarodowy certyfikat jakości. Kontrola jakości robót budowlanych prowadzona w formie certyfikacji obiektu ułatwi:

- uzyskanie akredytacji centrum
- umożliwi akredytację programów dydaktycznych w ramach UE
- obniży koszty eksploatacji z uwagi na niższą o 30% składkę ubezpieczenia przysługującą budynkom posiadającym certyfikat jakości, a także obniży nakłady na remonty w okresie eksploatacji.

Lp.	Wyszczególnienie robót	Jednostek [m ²]	Cena jednostkowa brutto zł/m ² powierzchni netto	Udział procentowy %	Wartość brutto tys zł
1	2	3	4	5	6
1	Prace przygotowawcze	9562	528	8,5	5049
2	Prace projektowe	9562	297	4,8	2849
3	Roboty budowlane	9562	4860	78,3	46471
4	Wyposażenie	9562	372	6	3557
5	Nadzór i kontrola jakości	9562	149	2,4	1425
		Razem:	6206	100	59351

Oszacowany całkowity koszt budynku synchrotronu wraz z infrastrukturą i zapleczem wynosi **60 milionów złotych**. Osobną pozycją kosztów jest wykup terenu.

B. Koszt synchrotronu

Na koszt synchrotronu składa się bardzo dużo składników. Dodatkowo, oszacowanie utrudnione jest różnymi możliwościami rozwiązań technicznych, różnymi wariantami realizacji projektu i zmianami zachodzącymi na rynku urządzeń składających się na całość projektu.

Znacznie łatwiej można dokonać oszacowania na podstawie kosztów budowy synchrotronów w innych krajach. W ostatnio zakończonych, znanych nam projektach, koszt budowy synchrotronu w Karlsruhe (2002 rok) wynosił 70 milionów DM. Synchrotron w Karlsruhe jest jednak mniejszy od planowanego do budowy a podany koszt budowy nie obejmuje kosztów osobowych pracowników oddelegowanych do budowy przez Centrum Badawcze Karlsruhe.

Znacznie trafniej będzie opierać się na kosztach budowy synchrotronu w Saskatoon w Kanadzie. Synchrotron oddano tam do użytku w 2005 roku, a rozmiary pierścienia akumulującego są praktycznie równe rozmiarom pierścienia w synchrotronie planowanym do budowy w Polsce. Synchrotron ten razem z pięcioma liniami eksperymentalnymi kosztował 170 milionów dolarów kanadyjskich czyli około 450 milionów złotych.

Od tej kwoty należy odjąć koszty linii eksperymentalnych i koszty budynku. Biorąc pod uwagę niższe koszty pracy w Polsce szacujemy, że koszt realizacji budowy synchrotronu w Polsce będzie wynosił w przybliżeniu **220 milionów złotych**.

C. Koszt linii eksperymentalnych.

Na ogół koszt budowy synchrotronu podaje się bez kosztów linii eksperymentalnych, gdyż koszty linii silnie zależą od ich przeznaczenia, a tym samym wyposażenia. W literaturze można spotkać oszacowanie, że koszt jednej linii pomiarowej wynosi średnio w granicach 1-2 miliony euro. Ponieważ w pierwszej fazie planujemy budowę 7 linii pomiarowych należy założyć ich koszt równy około **40 milionów złotych**.

D. Koszt eksploatacji.

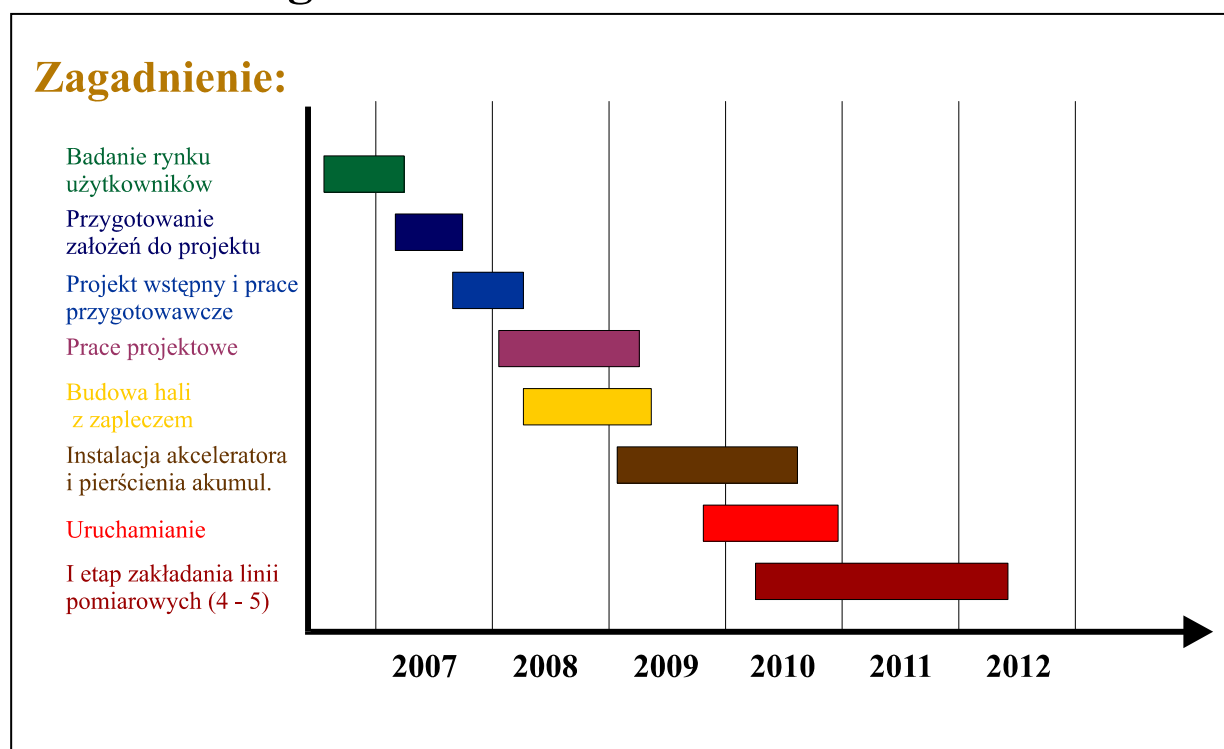
Synchrotron w Kanadzie działa jako narodowe źródło promieniowania synchrotronowego. Instytucja zatrudnia około 120 pracowników obsługi.

Roczne koszty wynagrodzenia tych pracowników razem z kosztami remontów, energii i materiałów potrzebnych do eksploatacji synchrotronu wynoszą 15 milionów dolarów kanadyjskich. Pokrywane są przez rząd federalny w kwocie 13 milionów i przez rząd prowincji w kwocie 2 milionów dolarów.

Zakładając podobne zatrudnienie w polskiej instytucji odpowiedzialnej za eksploatację synchrotronu, roczny pełny koszt eksploatacji szacujemy na około **20 milionów złotych**.

Wiele ośrodków (np. ANKA – Karlsruhe) wymaga niższych kosztów utrzymania gdyż duża część personelu jest pracownikami instytutów zewnętrznych.

9 Harmonogram



10 Baza danych publikacji z udziałem autorów polskich

Bazę danych zebrał i opracował dr Wojciech Paszkowicz (IF PAN, Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego). Załączony spis zawiera ponad 1000 pozycji i prawdopodobnie jest jeszcze niepełny.

Baza danych o publikacjach wykonanych z udziałem polskich autorów przy użyciu synchrotronowych źródeł promieniowania zebrał i opracował dr Wojciech Paszkowicz (IF PAN, Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego). Baza ta zawiera obecnie ponad 1000 pozycji.

Poniżej znajduje się lista 100 wybranych publikacji z lat 2002-2005. Wszystkie te publikacje są w czasopismach punktowanych według listy MNiI na 20 lub 24pkt.

1.	Biesiadka J, Bujacz G, M.M.Sikorski, Jaskolski M	Crystal structures of two homologous pathogenesis-related proteins from yellow lupine.	Journal of Molecular Biology 319, 2002 1223-1234	biology
2.	Dobrowolski Z. Drewniak T. Kwiatek W. Jakubik P.	Trace elements distribution in renal cell carcinoma depending on stage of disease	European Urology. 42(5):475-80, 2002 Nov.	medicine
3.	Drozdowski W, A.J. Wojtowicz	Fast 20 ns 5d-4f luminescence and radiation trapping in BaF ₂ Ce	Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A 486 , 412 (2002)	sources instruments
4.	Garbarczyk J, Paukszta D, Borysiak S	Polymorphism of isotactic polypropylene in presence of additives, in blends and in composites	JOURNAL OF MACROMOLECULAR SCIENCE-PHYSICS B41 (4-6): 1267-1278 2002	physics: general
5.	Guziewicz E, Orłowski BA, Kowalski BJ, I. Grzegory, S. Porowski	Photoemission study of samarium on GaN(0001) and CdTe(100)''	Applied Surface Science 190 (2002) 356-360.	surface
6.	Hilgeroth A, E.Tykarska, Jaskolski M	Crystal structure of a novel synthetic inhibitor of HIV-1 protease.	Journal of Mol. Struct. 605, 2002 63-70.	biology
7.	Janowski R. Bujacz G. Gerlach D. Jaskolski M	Crystallization and preliminary crystallographic studies of Streptococcus pyogenes cysteine protease precursor.	Acta Crystallographica D: Biological Crystallography 58, 2002 723-726	crystallography: biological
8.	Kozak M, D.Borek, R.Janowski, Jaskolski M	Crystallization of D90E mutant of Escherichia coli L-asparaginase II in five crystal forms.	Acta Crystallographica D: Biological Crystallography 58, 2002 130-132.	crystallography: biological
9.	Kukk E, Riu JRI, Stankiewicz M, P. A. Hatherly, P. Erman, E. Rachlew, P. Winiarczyk, M. Huttula, S. Aksela	Dissociation of deuteromethane following carbon 1s core ionization	Physical Review A 66 (1): Art. No. 012704 2002	physics: general
10.	Kwiatek WM. Drewniak T. Gajda M. Galka M. Hanson AL. Cichocki T	Preliminary study on the distribution of selected elements in cancerous and non-cancerous kidney tissues	Journal of Trace Elements in Medicine & Biology. 16(3):155-160, 2002.	medicine
11.	Lawniczak-Jablonska K, Suski T., Gorczyca I., Christensen N.E., Libera J., Kachniarz J., Lagarde P., Cortes R., Grzegory I.,	Anisotropy of atomic bonds formed by p-type dopants in bulk GaN crystals	Applied Physics A (Materials Science Processing), vol.75, 2002,pp. 577-583,	applied physics: materials
12.	Orłowski BA, Mickevicius S, Kowalski BJ,A.J. Nadolny, B. Taliashvili, J.Ghijsen, F. Mirabella, Johnson RL	X-ray and ultraviolet photoemission study of electronic structure of Sn1-xMnxTe MBE layers	Surface Science, 507-510C, 155 -159(2002)	surface science
13.	Paszkwicz W.,	High-pressure powder X-ray diffraction at the turn of the century	Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B, vol.198, 2002, pp. 142-182,	sources instruments
14.	Paszkwicz W., Pelka J., Knapp M., Szyszko T., Podsiadło S.,	Lattice parameters and anisotropic thermal expansion of hexagonal boron nitride in the 10-297.5 K temperature range	Applied Physics A (Materials Science Processing) 75 (3), 2002, pp. 431-435,	physics: applied

15.	Patrykiewicz A, Sokolowski S, Binder K	Incommensurate phases in adsorbed monolayers: structure and energy of domain walls	SURF SCI 512 (1-2): 1-15 JUN 20 2002	surface science
16.	Plucinski L, Strasser T, Kowalski BJ, Rosnagel K, Boetcher T, Einfeldt S, Hommel D, Grzegory I, Porowski S, Orłowski BA, Schattke W, Johnson RL	Electronic band structure of gallium nitride: a comparative angle-resolved photoemission study of single crystals and thin films	Surface Science 507-510C 223-228 2002	surface science
17.	Przeniosło R, Sosnowska I, Suard E, et al.	Phase coexistence in the charge ordering transition in CaMn ₇ O ₁₂	Journal of Physics-Condensed Matter 14 (23): 5747-5753 JUN 17 2002	physics: solid state
18.	Ryba-Romanowski W, S. Golab, G. Dominiak-Dzik, P. Solarz	Eu ³⁺ luminescence and Gd ³⁺ - Eu ³⁺ energy transfer in K ₅ Li ₂ GdF ₁₀ :Eu ³⁺	Applied Physics A (Materials Science Processing) 74 , 581 (2002)	physics: applied
19.	Sladeczek M, Sepiol B, Kaisermayr M, Korecki J, Handke B, Thiess H, Leupold O, Ruffer R, Vogl G	Enhanced iron self-diffusion in the near-surface region investigated by nuclear resonant scattering	Surface Science 507: 124-128 2002	surface science
20.	Stankiewicz M, Winiarczyk P, Rius i Riu J, Alvarez J, Erman P, Karawajczyk A, Rachlew E, Kuk E, Huttula M, Hatherly P	Selective fragmentation of valence- and core-electron-excited CD ₄ and SF ₆ molecules.	Surface Review & Letters, 2002, 9, 1, 117-124	surface science
21.	Szade J, Skorek G, Neumann M, Schneider B, Fangmeyer F, Matteucci M, Paolucci G, Goldoni A	Investigation of resonant photoemission from GdCu ₂ and Gd ₅ Si ₄	Surface Science 2002, 497 1-3, 29-37	surface science
22.	Wisniewski D, S. Tavernier, A.J. Wojtowicz, M. Wisniewska, P. Bruyndonckx, P. Dorenbos, E. van Loef, C.W.E. van Eijk, L.A. Boatner	LuPO ₃ Nd and YPO ₃ Nd - new promising VUV scintillation materials	Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A 486 , 239 (2002)	sources instruments
23.	Wojtowicz AJ, P. Bruyndonckx, W. Drozdowski, Z. Galazka, J. Glodo, T. Lukasiewicz, P. Szupryczynski, S. Tavernier, M. Wisniewska, D. Wisniewski	Traps and recombination centers in YAlO ₃ :Ce,Co	Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A 486 , 482 (2002)	sources instruments
24.	Baciewicz R, J. Filipowicz, S. Podsiadlo, T. Szyszko, M. Kaminski	Probing local order in (Ga,Mn)N alloys by X-ray absorption spectroscopy	Journal of Physics & Chemistry of Solids 64, 1469-1472 (2003)	physics & chemistry: solid state
25.	Baczmanski A, Brahm C, Seiler W	Microstresses in textured polycrystals studied by the multireflection diffraction method and self-consistent model	Philosophical Magazine 83 (28): 3225-3246 OCT 1 2003	physics: general
26.	Bujacz GD, Pasternak O, Y.Fujimoto, Y.Hashimoto, M.M.Sikorski, Jaskolski M	Crystallization and preliminary crystallographic studies of cytokinin-specific binding protein from mung bean.	Acta Crystallographica D: Biological Crystallography 59, 2003 522-525	crystallography: biological
27.	Filipek S, Stenkamp RE, Teller DC, Palczewski K	G protein-coupled receptor rhodopsin: a prospectus	Annual Review of Physiology, 2003, Vol. 65 Issue 1, p851, 29p;	medicine
28.	Filipek S, Teller DC, Palczewski K, Stenkamp R	The crystallographic model of rhodopsin and its use in studies of other g protein-coupled receptors	Annual Review of Biophysics & Biomolecular Structure, 2003, 32 1, 375-397	physics: biological
29.	Hasik M., Wenda E., Bernasik A., Kowalski K., Sobczak J.W.,	Poly(o-toluidine) as the matrix for incorporation of palladium species	Polymer, vol.44, 2003, pp. 7809-7819,	materials

	Sobczak E., Bielańska E., Janicki J	from PdCl ₂ aqueous solutions Time-resolved small-angle X-ray scattering and wide-angle X-ray diffraction studies on the nanostructure of melt-processable molecular composites	Journal of Applied Crystallography 36: 986-990 Part 4 AUG 2003	crystallography
30.				
31.	Kolodziejczyk R. Kochman M. Bujacz G. Dobryzyczny P. Ozyhar A. Jaskolski M.	Crystallization and preliminary crystallographic studies of Juvenile Hormone Binding Protein from <i>Galleria mellonella</i> hemolymph.	Acta Crystallographica D: Biological Crystallography 59, 2003 519-521.	crystallography: biological
32.	Misiuk A, Wierzchowski W, Wieteska K, et al.	Synchrotron topography of high temperature-pressure treated silicon implanted with helium	Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B 200: 358-362 JAN 2003	sources instruments
33.	Olczak A, Cianci M, Hao Q, Rizkallah PJ. Raftery J. Helliwell JR	S-SWAT (softer single-wavelength anomalous technique): potential in high-throughput protein crystallography	Acta Crystallographica A 59: 327-334 2003	crystallography
34.	Orlowski BA, Kowalik IA, Kowalski BJ, Suffczynski M, Mycielski A, Colonna S, Ottaviani C, Ronci F, Cricenti A	Differential reflectivity and photoemission study of ZnTe and CdTe (110) surface	Journal of Alloys & Compounds 382 (1-2): 224-227 2004	materials
35.	Pasenkiewicz-Gierula M, T. Rog, J. Grochowski, P. Serda, R. Czarnecki, T. Librowski, S. Lochynski	Effects of a Carene Derivative Local Anesthetic on a Phospholipid Bilayer Studied by Molecular Dynamics	Biophys. J., 85, 1248 - 1258 (2003)	biophysics
36.	Plucinski L, Johnson RL, Kowalski BJ, Kopalko K, Orlowski BA, Kovalyuk ZD, Lashkarev GV	Electronic band structure of GaSe(0001): Angle-resolved photoemission and ab initio theory	Physical Review B - Condensed Matter 68 (12): Art. No. 125304 2003	physics: solid state
37.	Szczerbowska-Boruchowska M, Lankosz M, Adamek D, Ostachowicz J, Krygowska-Wajs A, Szczudlik A, Bohic S, Simionovici A, Chwiej J	Determination of trace elements in Parkinson's diseased brain tissue using microbeam of synchrotron radiation	Journal of Neurochemistry 85: 23-23 Suppl. 2003	medicine
38.	Szczerbowska-Boruchowska M, Lankosz M, Ostachowicz J, Adamek D, Krygowska-Wajs A, Tomik B, Szczudlik A, Simionovici A, Bohic S	Application of synchrotron radiation for elemental microanalysis of human central nervous system tissue	Journal de Physique IV 104: 325-328 MAR 2003	physics: general
39.	Wierzchowski W, Wieteska K, Graeff W, et al.	X-ray studies of Al(x)Ga(1-x)As implanted with 1.5 MeV As ions	Vacuum 70 (2-3): 115-121 MAR 10 2003	cryst growth
40.	Wieteska K, Wierzchowski W, Graeff W, et al.	Bragg-case section topography of growth defects in Si : Ge crystals	Journal of Physics D: Applied Physics 36 (10A): A133-A138 Sp. Iss. SI MAY 21 2003	physics: applied
41.	Adell M, L. Ilver, J. Kanski, J. Sadowski, R. Mathieu	Photoemission studies of the annealing induced modifications of (Ga,Mn)As	Physical Review B - Condensed Matter 70, 125204 (2004)	physics: solid state
42.	Bak-Misiuk J., Misiuk A., W. Paszkowicz, A. Shalimov, J. Härtwig, L. Bryja, J.Z. Domagala, J. Trela, W. Wierzchowski, K. Wieteska, J. Ratajczak, W. Graeff	Influence of high pressure and temperature on defect structure of silicon crystals implanted with N or Si ions	Journal of Alloys & Compounds, vol.362 (2004) 275-281	materials
43.	Broda J	Influence of processing on structure of beta-nucleated poly(propylene) fibers	Journal of APPL POLYM SCI 91 (3): 1413-1418 FEB 5	materials

			2004	
44.	Butterfield MT, T. Durakiewicz, Guziewicz E, J.J. Joyce and A.J. Arko, D.P. Moore and L.A. Morales	Photoemission and Surface Science of delta Plutonium”	Surface Science 571 (2004) 74-82	surface science
45.	Durakiewicz T, C. D. Batista, Joe D. Thompson, Cliff Olson, J. Joyce, G. H. Lander, J.E. Gubernatis, Guziewicz E, M.T. Butterfield, Al Arko, J. Bonca, K. Mattenberger and O. Vogt	Direct observation of itinerant magnetism in UTe”	Physical Review Letters 93 (2004) 267205	physics: general
46.	Durakiewicz T, J.J. Joyce, G. H. Lander, C.G. Olson, M. T. Butterfield, Guziewicz E, A.J. Arko, L. Morales, J. Rebizant, K. Mattenberger, O. Vogt	Electronic Structure of Actinide Antimonides and Tellurides from Photoelectron Spectroscopy”	Physical Review B - Condensed Matter 70 (2004) 205103 (1-11)	physics: solid state
47.	Dygdala RS, Zawadzka A, Lisak D, Plociennik P, Trawiński RS	Investigation of highly excited states of calcium by three-photon ionization.	European Physical Journal D -- Atoms, Molecules, Clusters & Optical Physics, Jul2004, Vol. 30 Issue 1, p15-22,	physics: general
48.	Guziewicz E, T. Durakiewicz, M. T. Butterfield, C.G. Olson, J.J. Joyce, A.J. Arko, J.L. Sarrao, D.P. Moore, L. Morales	Angle-resolved photoemission study of USb2: the 5f band structure”	Physical Review B - Condensed Matter 69 (2004) 045102	physics: solid state
49.	Jablonska A, A. Burian, A.M. Burian, M. Borowski,	Structural studies of amorphous In-Se by EXAFS,	Journal of Alloys & Compounds, 362 (2004) 167-170.	materials
50.	Jablonski A, Powell CJ	Electron effective attenuation lengths in electron spectroscopies	Journal of Alloys & Compounds 362 (1-2): 26-32 2004	materials
51.	Janowski R, M. Abrahamson, A. Grubb, Jaskolski M	3D Domain-Swapped Dimers of N-Truncated Human Cystatin C.	Journal of Molecular Biology 341, 2004 151-160	biology
52.	Korecki P, Novikov DV, Tolkiehn M, Materlik G	Extinction effects in x-ray holographic imaging with internal reference	PHYSICAL REVIEW B 69 (18): Art. No. 184103 2004	physics: solid state
53.	Kowalik IA, Kowalski B., Orłowski B., Łusakowska E., Iwanowski R., Mickevicius S., Johnson R.L., Grzegory I., Porowski S.,	Photoemission study of Mn/GaN	Surface Science 566-568, 2004, 457-461	surface science
54.	Kowalski BJ, Iwanowski RJ, J. Sadowski, I.A. Kowalik, J. Kanski, I. Grzegory, S. Porowski	Electronic structure of GaN(0001) surface	Surface Science. 548, 220 (2004)	surface science
55.	Lankosz M, Szczerbowska-Boruchowska M, Chwiej J, Ostachowicz J, Simionovici A, Bohic S	Research in quantitative microscopic X-ray fluorescence analysis	Spectrochimica Acta B 59 (10-11): 1517-1521 2004	spectroscopy
56.	Parlinski K, Jochym PT, Leupold O, A. I. Chumakov, R. Rüffer, H. Schober, A. Jianu, J. Dutkiewicz, and W. Maziarz	Local modes of Fe and Co atoms in NiAl intermetallics	Physical Review B - Condensed Matter 70 (22): Art. No. 224304 2004	physics: solid state
57.	Paszkowicz W. Knapp M., Bächtz C., Minikayev R., Piszora P., Jiang J.Z., Bacewicz R.	Synchrotron X-ray wavelength calibration using a diamond internal standard: application to low-temperature thermal-expansion studies	Journal of Alloys & Compounds, vol.382 1-2 (2004) 107-111	materials
58.	Paszkowicz W., Minikayev R., Piszora P., Knapp M., Bahtz C., Recio J., Marques M., Mori-Sanchez P., Gerward L., Jiang Y.	Thermal expansion of spinel-type Si3N4	Physical Review B - Condensed Matter, Vol.69, 2004, 52103-1-4,	physics: solid state

59.	Paszkowicz W., Szuszkiewicz W., Dynowska E., Domagala J.Z., Firszt F., Męczyńska H., Łęgowski S., Lathe C.,	High-pressure structural and optical properties of wurzite-type Zn _{1-x} MgxSe	Journal of Alloys & Compounds, vol.371, 2004, 168-171,	materials
60.	Pieczka A, Kraczka J	Oxidized tourmalines - a combined chemical, XRD and Mossbauer study	EUR J MINERAL 16 (2): 309-321 MAR-APR 2004	mineralogy
61.	Piskorska E., Lawniczak-Jabłońska K., Benko E., Demchenko I., Benko E., Welter E.,	X-ray absorption studies of phases formation in a Ti/TiN coating on cubic boron nitride	Journal of Alloys & Compounds, vol.362, 2004, 171-177,	materials
62.	Piszora P, W. Nowicki, J. Darul, E. Wolska	Synthesis and characterization of the lithium deficient Fe-substituted Li-Mn oxide spinel phases	Materials Letters 58, 1321-1326 (2004)	materials
63.	Plucinski L, Johnson RL, A. Fleszar, W. Hanke, W. Weigand, C. Kumpf, C. Heske, E. Umbach, T. Schallenberg, L.W. Molenkamp	Valence band electronic structure of ZnSe(001): Theory and Experiment	Physical Review B - Condensed Matter, 70, 125308 (2004)	physics: solid state
64.	Rabiej S, Goderis B, Janicki J, et al.	Characterization of the dual crystal population in an isothermally crystallized homogeneous ethylene-1-octene copolymer	POLYMER 45 (26): 8761-8778 DEC 9 2004	materials
65.	Sikora M, Cz. Kapusta, D. Zajac, W. Tokarz, C.J. Oates, M. Borowiec, D. Rybicki, E. Goering, P. Fischer, G. Sch utz, J.M. De Teresa, M.R. Ibarra	X-MCD magnetometry of CMR perovskites La _{0.67-y} REyCa _{0.33} MnO ₃	Journal of Magnetism & Magnetic Materials, 272-276, 21482150 (2004)	materials
66.	Sikora M, Cz. Kapusta, L. Maksymowicz, M. Lubecka, B. Ciecwiwa, R. Szymczak, E. Welter, M. Borowiec, D. Zajac	EXAFS study of indium doped magnetic semiconductor CdCr ₂ Se ₄	Journal of Alloys & Compounds, 362, 151-155 (2004)	materials
67.	Sladeczek M, Sepiol B, Korecki J, et al.	Dynamics in submonolayer Fe-films	Surface Science 566: 372-376 20 2004	surface science
68.	Solarz P, G. Dominiak-Dzik, R. Lisiecki, W. Ryba-Romanowski	Conversion of VUV to UV and visible in K ₅ Li ₂ LnF ₁₀ containing rare-earth from cerium group (Ln = La ³⁺ , Ce ³⁺ , Pr ³⁺ +Nd ³⁺)	Radiation Measurements 38, 603-606 (2004)	sources instruments
69.	Stankiewicz M, Garcia EM, Ruiz JA, Erman P, Hatherly P. A., Kivimaki A, Rachlew E, Rius i Riu J.	Experimental station for gas phase fluorescence spectroscopy	Review of Scientific Instruments 75 (7): 2402-2408 JUL 2004	sources instruments
70.	Styczynski J, Cheung YK, Garvin J, et al.	Outcomes of unrelated cord blood transplantation in pediatric recipients	BONE MARROW TRANSPL 34 (2): 129-136 JUL 2004	medicine
71.	Szczerbowska-Boruchowska M, Lankosz M, Ostachowicz J, et al.	Topographic and quantitative microanalysis of human central nervous system tissue using synchrotron radiation	X-Ray Spectrometry 33 (1): 3-11 JAN-FEB 2004	medicine
72.	Tamulaitiene G, Grazulis S, Janulaitis A, R.Janowski, Bujacz G, Jaskolski M	Crystallization and preliminary crystallographic studies of a bifunctional restriction endonuclease Eco57I.	Biochimica and Biophysica Acta (PROTEINS PROTEOMICS)1698, 2004 251-254.	biology
73.	Waskowska A, L. Gerward, J.S. Olsen, E. Malicka	Temperature and pressure induced lattice distortion in CdCr _{2-x} GaxSe ₄	Journal of Physics: Condensed Matter 14, 12423-12431 (2004)	physics: condensed matter
74.	Waskowska A., L. Gerward, J.S. Olsen, M. Feliz, R. Llusar, L. Gracia, M. Marques, J.M. Recio	High-pressure behaviour of selenium based spinels and related structures - an experimental and theoretical study	Journal of Physics-Condensed Matter 16, 53-63 (2004)	physics: solid state
75.	Wierzchowski W., Wieteska K., Auleytner J., Graeff W., Zymiarska	Synchrotron x-ray diffraction studies of silicon implanted with high-energy	Journal of Alloys & Compounds, vol.382,	materials

	D.,	Ar ions after thermal annealing	2004, 146-152,	
76.	Wieteska K, W. Wierzchowski, W. Graeff, G. Kuri, A. Misiuk, A. Tuross, G. Gawlik	Reciprocal space mapping of implanted AlIBV semiconductor compounds	Journal of Alloys & Compounds, 362, 297-300 (2004)	materials
77.	Zajac D, Cz. Kapusta, P.C. Riedi, M. Sikora, C.J. Oates, D. Rybicki, J. Blasco, D. Serrate, J.M. De Teresa, M.R. Ibarra	NMR and X-MCD study of Sr1-3xBa1+xLa2xFeMoO6	Journal of Magnetism & Magnetic Materials, 272-276, 17561758 (2004)	materials
78.	Adell M, Ilver L, Kanski J, Stanciu V, Svedlindh P, Sadowski J, Domagala JZ, Terki F, Hernandez C, Charar S	Postgrowth annealing of (Ga,Mn)As under As capping: An alternative way to increase T-C	Applied Physics Letters, vol.86 (11) (2005) 112501-1 - 3,	physics: applied
79.	Bacewicz R, M. Wasiucioneck, A. Twarog, J. Filipowicz, P. Jozwiak, J. Garbarczyk	A XANES study of the valence state of vanadium in lithium vanadate phosphate glasses	Journal of Materials Science 40, 1-4 (2005)	materials
80.	Bartnik A, Fiedorowicz H, Jarocki R, et al.	Micromachining of organic polymers by X-ray photo-etching using a 10 Hz laser-plasma radiation source	MICROELECTRON ENG 78-79: 452-456 Sp. Iss. SI MAR 2005	materials
81.	Chwiej J, Fik-Mazgaj K, Szczerbowska-Boruchowska M, Lankosz M, Ostachowicz J, Adamek D, Simionovici A, Bohic S	Classification of nerve cells from substantia nigra of patients with Parkinson's disease and amyotrophic lateral sclerosis with the use of X-ray fluorescence microscopy and multivariate methods	Analytical Chemistry 77 (9): 2895-2900 MAY 1 2005	chemistry
82.	Chwiej J, Szczerbowska-Boruchowska M, Wojcik S, Lankosz M, Chlebda M, Adamek D, Tomik B, Setkowicz Z, Falkenberg G, Stegowski Z, Szczudlik A.	Implementation of X-ray fluorescence microscopy for investigation of elemental abnormalities in central nervous system tissue	Journal of Alloys & Compounds 401 (1-2): 184-188 2005	materials
83.	Godowski PJ, Onsgaard J, Gagor A, Kondys M, Li ZS	Investigation of the CO+NO reaction over the Cu(001) surface	Chemical Physics Letters 406 (4-6): 441-445 2005	physics: chemical
84.	Handke B, Kozlowski A, Parlinski K, Przewoznik J, Slezak T, Chumakov AI, Niesen L, Kakol Z, Korecki J	Experimental and theoretical studies of vibrational density of states in Fe3O4 single-crystalline thin films	Physical Review B - Condensed Matter 71 (14): Art. No. 144301 2005	physics: solid state
85.	Hawelek L, Koloczek J, Burian A, Dore J.C, Honkimäki V, Kyotani T.	Application of image plate for structural studies of carbon nanotubes by high-energy X-ray diffraction,	Journal of Alloys & Compounds 401 (2005) 51-54	materials
86.	Karbowiak M, A. Mech, W. Ryba-Romanowski	Optical properties of Eu3+ : CsGd2F7 downconversion phosphor	Journal of Luminescence 114, 65-70 (2005)	optics
87.	Klik MAJ, Gregorkiewicz T, Yassievich IN, et al.	Terahertz modulation of the blue photoluminescence in ZnSe	Physical Review B - Condensed Matter 72 (12): Art. No. 125205 2005	physics: solid state
88.	Kozak M	Direct comparison of the crystal and solution structure of glucose/xylose isomerase from Streptomyces rubiginosus	Protein & Peptide Letters 12 (6): 547-550 AUG 2005	biology
89.	Kuck S, Sokolska I, Henke M, T. Scheffler, and E. Osiać	Emission and excitation characteristics and internal quantum efficiencies of vacuum-ultraviolet excited Pr3+-doped fluoride compounds	Physical Review B - Condensed Matter 71 (16): Art. No. 165112 2005	physics: solid state
90.	Palosz B, Grzanka E, C. Pantea, T. W. Zerda, Y. Wang, J. Gubicza, T. Ungar	Microstructure of nanocrystalline diamond powder studied by powder diffractometry	Journal of Applied Physics, 97, 064316 (2005).	physics: applied
91.	Pasternak O, J.Biesiadka, R.Dolot, Bujacz G, M.M.Sikorski, Jaskolski	Crystal structure of a yellow lupine pathogenesis-related PR-10 protein	Acta Crystallographica D:	crystallography:

	M	belonging to a novel subclass.	Biological Crystallography 61, 2005 99-107	biological
92.	Rabiej S	The influence of side branches on the structure of crystalline phase in ethylene-1-alkene copolymers	EUR POLYM J 41 (2): 393-402 FEB 2005	materials
93.	Rokita E, Chevallier P, Mutsaers PHA, Tabor Z, Wróbel A	Studies of crystal orientation and calcium distribution in trabecular bone	Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B 240 (1-2): 69-74 OCT 2005	sources instruments
94.	Rzadkiewicz J, Chmielewska D, Sujkowski Z, Berset M, Dousse JC, Maillard Y.-P, Mauron O, Raboud P.-A, Polasik M, Słabkowska K, Hoszowska J, Pajek M..	Natural widths of hypersatellite K-X-ray lines and lifetimes of double K-hole states in mid-Z atoms.	Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B, Jul2005, Vol. 235 Issue 1-4, p110-115, 6p	sources instruments
95.	Szczerbowska-Boruchowska M, Chwiej J, Lankosz M, et al.	Intraneuronal investigations of organic components and trace elements with the use of synchrotron radiation	X-Ray Spectrometry 34 (6): 514-520 NOV-DEC 2005	spectroscopy
96.	Szydłowska-Czerniak A, Karlovits G, Lach M, et al.	X-ray diffraction and differential scanning calorimetry studies of beta' - > beta transitions in fat mixtures	FOOD CHEMISTRY 92 (1): 133-141 AUG 2005	chemistry
97.	Walczak M, Lawniczak-Jablonska K, A. Sienkiewicz, I.N. Demczenko, E. Piskorska, G. Chatain, D.S. Bohle	Local environment of iron in malarial pigment and its substitute beta-hematin	Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section 238, 32-38 (2005)	sources instruments
98.	Waskowska A.,L. Gerward, J.S. Olsen, M. Maczka, T. Lis, A. Petraszko, W. Morgenroth	Low temperature and high pressure structural behaviour of NaBi(MoO4)2 - an X-ray diffraction study.	Journal of Solid State Chemistry 178, 2218-2224 (2005)	chemistry: solid state
99.	Wierzchowski W, Wieteska K, Graeff W, et al.	X-ray diffraction studies of GaAs implanted with 1.5 MeV Se+ ions	Vacuum 78 (2-4): 569-575 MAY 30 2005	cryst growth
100.	Winter R, Dzwolak W	Exploring the temperature-pressure configurational landscape of biomolecules: from lipid membranes to proteins	Philosophical Transactions ROY SOC A : 363 (1827): 537-562 FEB 15 2005	physics: general