

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова
Российской академии наук



ИТОГИ 2012 ГОДА



Основные направления и темы НИР

1. Нано- и биоорганические материалы: получение, синтез, структура и свойства, методы диагностики с использованием рентгеновского и синхротронного излучения, электронов, нейтронов и атомно-силовой микроскопии

1.1. Развитие методов диагностики неорганических, органических и биоорганических материалов с использованием рентгеновского и синхротронного излучений, электронов и нейтронов

Научный руководитель: Ковальчук М.В.

Отв. исполнители: Асадчиков В.Е., Благов А.Е., Макарова И.П.

1.2. Создание, изучение структуры и свойств органических и биоорганических материалов

Научный руководитель: Ковальчук М.В.

Отв. исполнители : Букреева Т.В., Куранова И.П., Стрелов В.И., Терещенко Е.Ю.

1.3. Изучение структуры и свойств наноматериалов с использованием электронов и атомно-силовой микроскопии

Научный руководитель: Авилов А.С.

Отв. исполнители : Артемов В.В., Запорожец М.А., Клечковская В.В., Толстихина А.Л.

1.4. Ядерно-резонансные и синхротронные исследования кристаллических материалов и магнитных наноструктур, в том числе в экстремальных условиях высоких давлений и низких температур

Научный руководитель : Любутин И.С.

Отв. исполнитель: Фролов К.В.



Основные направления и темы НИР

2. Фундаментальные аспекты образования кристаллических материалов и наносистем, их реальная структура и свойства

2.1. Теоретическое моделирование структуры и свойств неорганических, органических и биологических материалов

Научный руководитель: Пикин С.А.

Отв. исполнители : Белов А.Ю., Горкунов М.В., Дмитриенко В.Е., Петухов В.В.,
Носик В.Л.

2.2. Исследования процессов образования кристаллических материалов, их дефектной структуры и свойств, в том числе под влиянием внешних воздействий

Научный руководитель: Волошин А.Э.

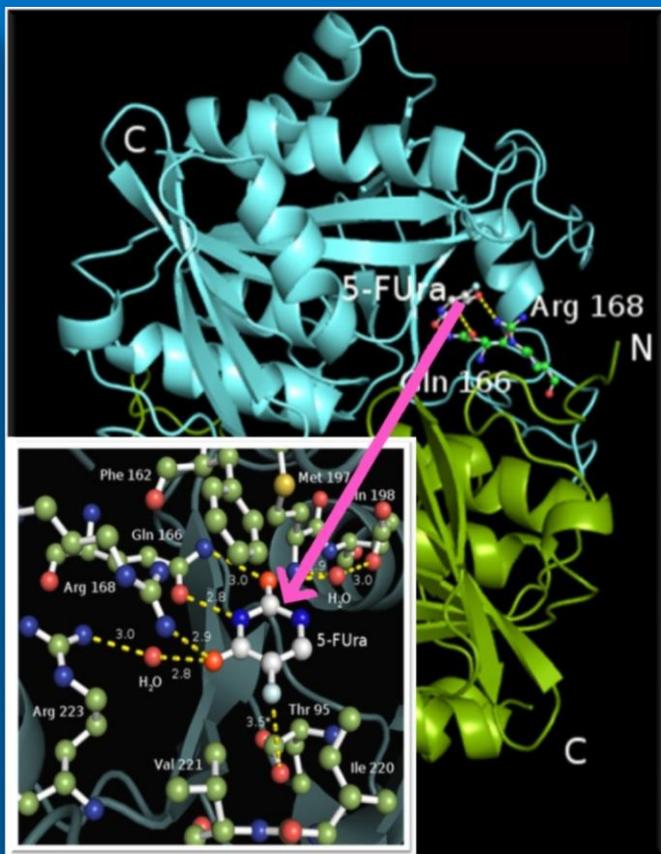
Отв. исполнители: Альшиц В.И., Волк Т.Р., Палто С.П., Руднева Е.Б.

3. Новые кристаллические и функциональные материалы

Научный руководитель: Каневский В.М.

Отв. исполнители: Буташин А.В., Гиваргизов Е.И., Иванов И.А., Иванов Ю.М.,
Каминский А.А., Мчедлишвили Б.В., Писаревский Ю.В.,
Соболев Б.П., Стрелов В.И., Федоров В.А.

Научные достижения



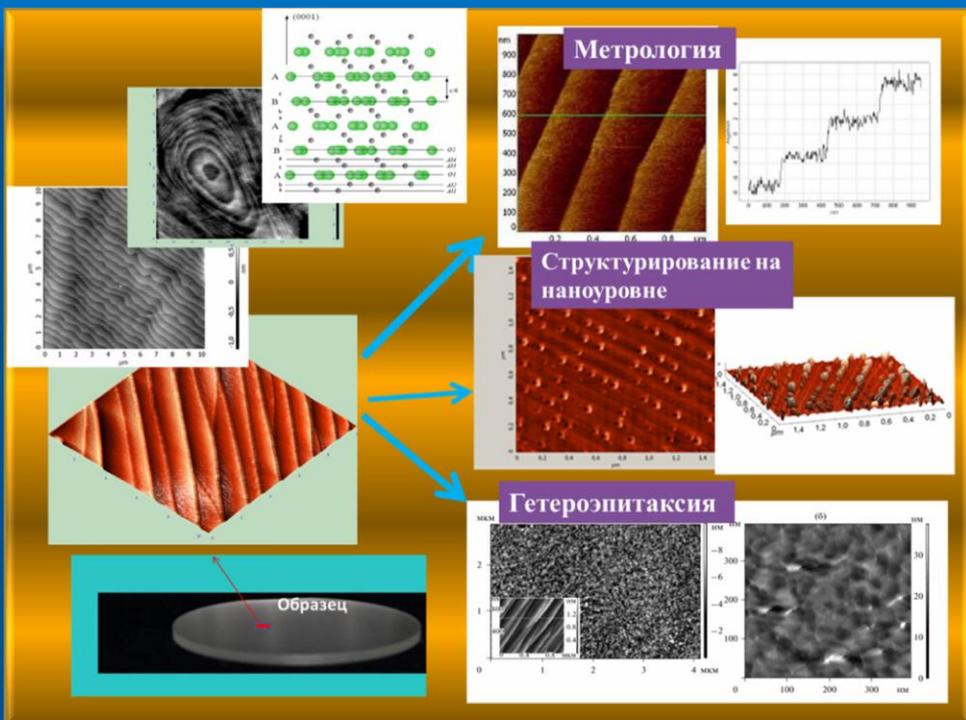
Исследование бактериальной уридинофосфорилазы методами структурной биологии

Изучены макромолекулярные комплексы уридинфосфорилазы клеток человека – фермента, принимающего участие в метаболизме противоопухолевых и антибактериальных препаратов. Впервые для исследования этих макромолекулярных комплексов использована совокупность *in silico* методов. На базе полученных структурных данных проведено рациональное конструирование новых ингибиторов уридинфосфорилаз методом комбинационного скрининга. Определены формулы 8-соединений, имеющие наибольшие константы связывания с бактериальными уридинфосфорилазами.

Общий вид гомодимера молекулы уридинфосфорилазы и ее активный центр

Научные достижения

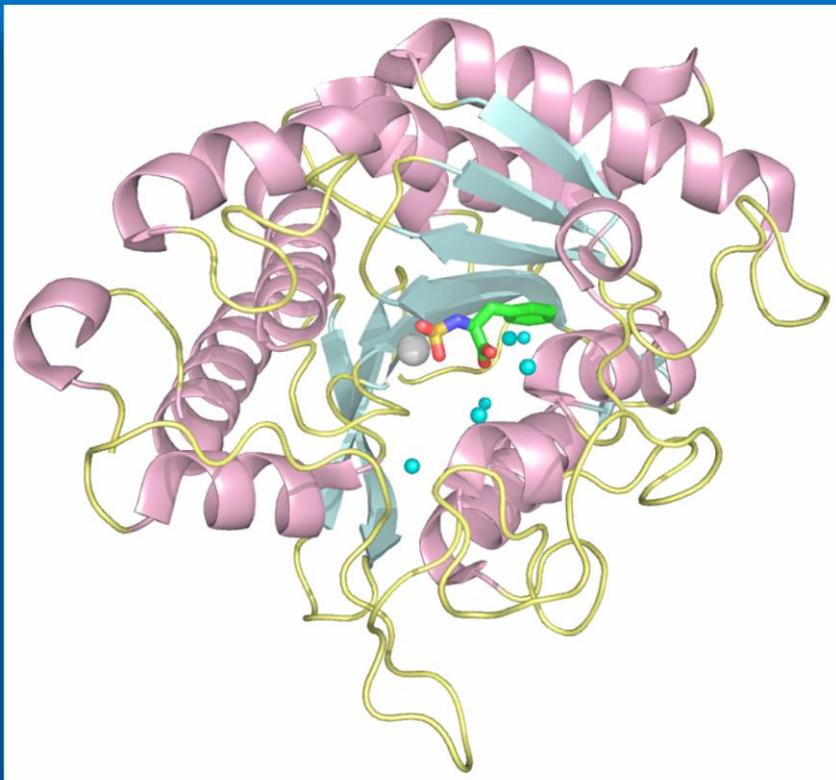
Террасно-ступенчатые наноструктуры на поверхности кристаллов сапфира: рост, характеристика и применение в нанотехнологиях



Предложен новый подход к созданию функциональных устройств микроэлектроники с использованием самоорганизующего эффекта нанорельефной поверхности подложки. Разработана и теоретически обоснована технология получения рельефных подложек лейкосапфира с шириной террас $10 \div 500$ нм и высотой ступеней $0.22 \div 5$ нм. Запатентован тестовый образец для калибровки атомно-силовых микроскопов. Получены упорядоченные ансамбли металлических нанокластеров, которые могут найти применение в качестве волноводов в наноплазмонике.

Нанорельефные подложки лейкосапфира: получение и некоторые применения

Научные достижения



Молекула металлокарбоксипептидазы Т с ионом цинка и связанным лигандом в активном центре

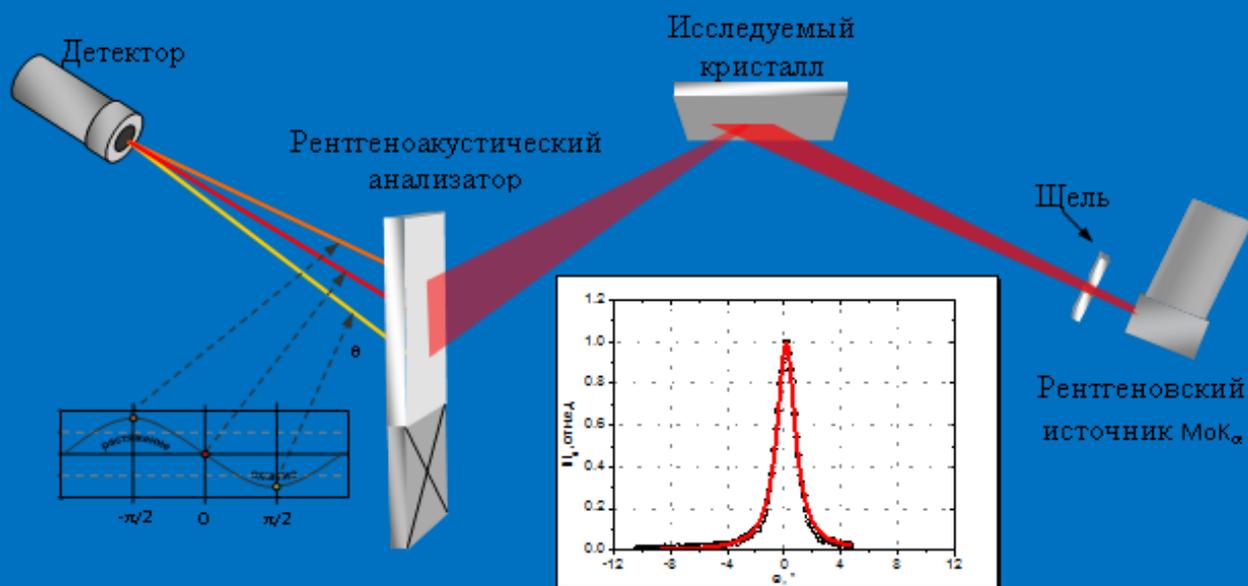
Исследование структурных детерминант специфичности карбоксипептидазы Т

Изучена структурная обусловленность селективности бактериальной металлокарбоксипептидазы Т: выращены кристаллы и исследовано одиннадцать пространственных структур металлокарбоксипептидазы Т и ее мутантных форм в свободном виде и в комплексе с лигандами. Установлена роль ионов кальция как детерминант селективности; в активном центре металлокарбоксипептидазы Т идентифицированы новые аминокислотные остатки, существенные для селективности фермента.



Научные достижения – инновационная составляющая

Прибор для регистрации кривых дифракционного отражения с помощью адаптивной рентгеновской акустооптики

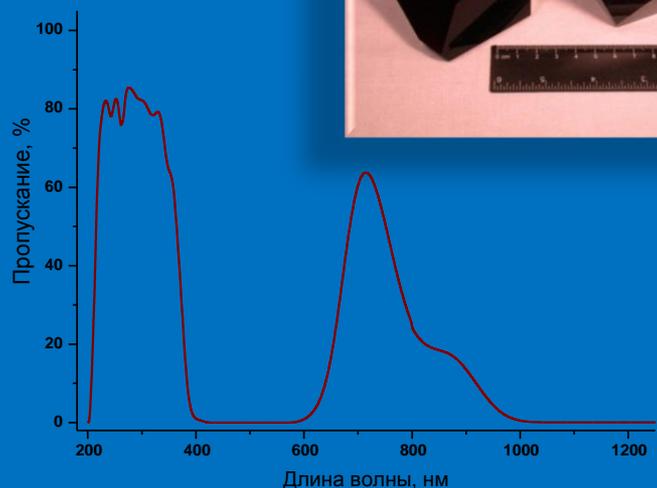


Впервые в мире предложен и реализован метод измерения кривых дифракционного отражения (КДО) за счет ультразвуковой модуляции параметра решетки одного из элементов рентгенооптической схемы. Метод основан на взаимодействии длинноволнового ультразвука с рентгеновским излучением в кристаллах (длина волны ультразвука составляет десятки миллиметров и многократно превышает ширину рентгеновского пучка). Данный метод записи был успешно реализован на специально созданном приборе – рентгеноакустическом дифрактометре, основой для которого послужил рентгеновский дифрактометр ТРС разработки ИК РАН.



Научные достижения – инновационная составляющая

Кристаллы для оптических фильтров УФ-диапазона

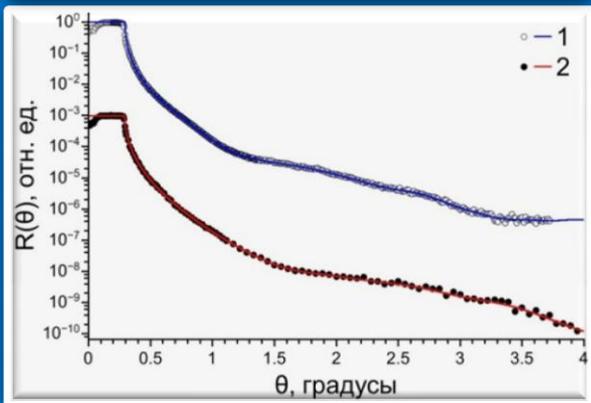
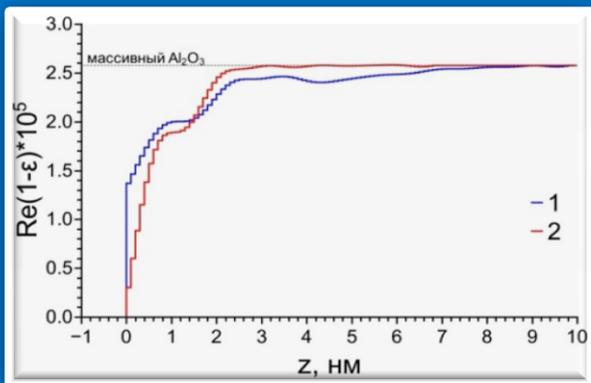


Впервые получены крупные кристаллы $K_2Co(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (KCSH) оптического качества и разработана технология их выращивания. С использованием кристаллов KCSH разработана и запатентована конструкция солнечно-слепого объектива для обнаружения ультрафиолетового излучения в солнечно-слепом спектральном диапазоне. Солнечно-слепой объектив, использующий в качестве фильтра кристалл KCSH, вошел в состав УФ детектора, с помощью которого можно эффективно проводить инспекции высоковольтных и распределительных сетей, осуществлять экологический мониторинг, в том числе труднодоступных территорий.

Внешний вид и спектральная характеристика кристаллов $K_2Co(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (KCSH)

Научные достижения

Методика определения шероховатости и толщины нарушенных слоев на пластинах сапфира



Разработана методика определения шероховатости и толщины нарушенных слоев на пластинах сапфира, основанная на измерении кривых полного внешнего отражения рентгеновских лучей от поверхностей полированных пластин сапфира, и независимом измерении рассеяния рентгеновского излучения от этих пластин в условиях полного внешнего отражения. Ожидаемым техническим эффектом от внедрения этой методики должно стать повышение выхода годности конечного продукта за счет входного контроля до стадии эпитаксии при получении структур кремний на сапфире в процессе производства радиационно-стойких и СВЧ-микросхем.

Экспериментальные данные (а) и результаты восстановления профиля плотности по глубине (б) для двух образцов подложек сапфира



Результаты конкурса научных работ

Премия имени академика А.В. Шубникова

А.А. Лашков, С.Е. Сотниченко, И.И. Прокофьев

«Создание модифицированного лекарственного препарата на базе 5-фторурацила – на основании исследований бактериальной уридинофосфорилазы в нелигандированном состоянии её комплексов методами структурной биологии»

Премия имени академика Б.К. Вайнштейна

**А.Э. Муслимов, В.М. Каневский, В.П. Власов, В.Е. Асадчиков, А.В. Буташин,
Ю.О. Волков, М.Л. Занавескин, И.А. Прохоров, В.А. Фёдоров**

«Террасно-ступенчатые наноструктуры на поверхности кристаллов сапфира: рост, характеристика и применение в нанотехнологиях»

Премия имени академика Н.В. Белова

В.И. Тимофеев (рук. И.П. Куранова)

«Исследование структурных детерминант специфичности карбоксипептидазы Т»



Результаты конкурса научных работ

Первые премии на общем конкурсе

И.В. Кожевников

Разработка самосогласованного модельно независимого подхода к исследованию 3D структуры слоисто-неоднородных сред методом рентгеновской рефлектометрии

И.П. Макарова, В.В. Гребенев, Т.С. Чёрная, И.А. Верин, А.Л. Васильев, В.В. Долбина

Структурная обусловленность изменений физических свойств в кристаллах $M_m H_n (XO_4)_{(m+n)/2}$

Первые премии на молодежном конкурсе

А.В. Таргонский (рук. *М.В. Ковальчук, Ю.В. Писаревский*)

Развитие экспериментальной аппаратуры и методов измерения кривых дифракционного отражения на основе немеханического управления рентгеновским пучком с помощью рентгеновской акустооптики

А.С. Кумсков (рук. *Н.А. Киселёв*)

Структура нанокompозитов одномерный кристалл катионного проводника во внутреннем канале ОСНТ

Первая премия на студенческом конкурсе

А.М. Антипин (рук. *О.А. Алексеева*)

Рентгендифракционное исследование кислородпроводящих $cLn_2O_3-MoO_3-V_2O_5$, где $Ln=La, Nd$



Публикации научных сотрудников

Опубликовано

226 статей, 2 обзора

Сделано

325 докладов



Публикации научных сотрудников

Изданы книги:

- Отв. редактор **М.В. Ковальчук** «Борис Константинович Вайнштейн – Кристаллография и жизнь». Физматлит.
- **Л.М. Блинов** «Жидкие кристаллы: структура и свойства». Изд. УРСС.
- **Р.К. Расцветаева, Н.В. Чуканов, С.М. Аксенов** «Группа эвдиалита: кристаллохимия, свойства, генезис». Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

Главы в монографиях:

- **V.E. Asadchikov, A.V. Butashin, V.M. Kanevsky, A.E. Muslimov, B.S. Roshchin** «Synthetic Sapphire: Growth and Surface Investigations» // in book «Sapphire: Structure, Technology, and Application». Nova Science Publishers.
- **S.A. Pikin** «On Solidification and Fluctuations at the Boundary of the Earth's Inner Core» // in book «The Earth's Core: Structure, Properties and Dynamics». Nova Science Publishers.



Интеллектуальная собственность

Выданы патенты на изобретение:

1.«Способ и устройство для регистрации кривых дифракционного отражения» № 2466384.

Выданы патенты на полезную модель:

1.«Устройство для выращивания кристаллов» № 120104.

2.«Устройство для выращивания кристаллов» № 120658.

Подано:

3 заявки на изобретение,

2 заявки на полезную модель



Участие в ФЦП, программах РАН, РФФИ

ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы»

9 госконтрактов

2 договора

ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы»

2 госконтракта

2 соглашения

Федеральная космическая программа России на 2006-2015 годы

5 договоров

Грант Президента РФ для государственной поддержки молодых ученых кандидатов наук

2 гранта

Ведущие научные школы

2 гранта

Программы ОФН и Президиума РАН: 13 проектов

РФФИ: 33 проекта

в т.ч.: 4 мол_а

6 офи_м

19 инициативные

4 прочие



Диссертационный совет Д 002.114.01

**Проведено 7 заседаний совета, на которых рассмотрено
2 докторские и 5 кандидатских диссертаций.**

Докторские диссертации:

01.04.18 - кристаллография, физика кристаллов

Александров Анатолий Иванович
(Ивановский государственный университет)

"Структура мезогенов в объемных образцах и пленках Ленгмюра-Блоджетт"

Дудка Александр Петрович

"Разработка и экспериментальная реализация метода получения точных и воспроизводимых структурных параметров из дифракционных данных"



Диссертационный совет Д 002.114.01

Кандидатские диссертации:

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Плаксеев Александр Андреевич

«Диэлектрические свойства сегнетоэлектрических наноразмерных пленок и нанокристаллов на основе сополимера винилиденфторида с трифторэтиленом»

Коновалова Анастасия Олеговна (МГТУ МИРЭА)

«Особенности локальных магнитных и валентных состояний ионов железа в перовскито-подобных соединениях системы $Bi_{1-x}Sr_xFeO_3$ при $x = 0 \div 1$ »

Амарантов Сергей Владимирович

«Моделирование формы белков шаперонинов в растворе по решению прямой и обратной задачи малоуглового рассеяния с использованием формфактора тора»



Диссертационный совет Д 002.114.01

Кандидатские диссертации:

01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов

Новикова Наталия Евгеньевна

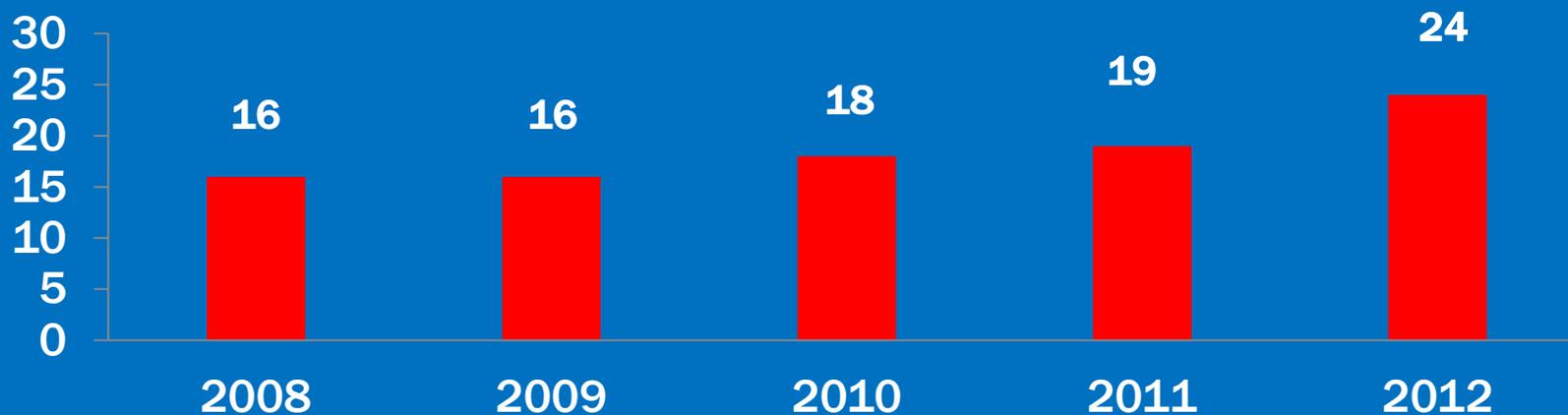
«Структура и пьезоэлектрические свойства монокристаллов семейства титанил-фосфата калия».

Муслимов Арсен Эмирбегович

«Влияние рельефа подложек лейкосапфира на процессы роста эпитаксиальных пленок теллурида кадмия и частиц золота».

Аспирантура

Численность аспирантов



В настоящее время в аспирантуре Института обучается 24 человека.



Подготовка научных кадров

Научно-образовательный центр ИК РАН «Создание и диагностика кристаллических, нано- и биоорганических материалов»

Руководитель член-корр. РАН М.В. Ковальчук

Зам. руководителя Макарова И.П., Фролов К.В.

Учрежден в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России»

Соисполнители - физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, физический факультет Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

Основные научные направления деятельности НОЦ:

- развитие и применение методов рентгеновской диагностики наносистем;
- биоорганические материалы: создание, изучение структуры и свойств;
- фундаментальные аспекты образования и функционирования наноматериалов и наносистем;
- структура и свойства кристаллических и наноструктурированных материалов.



Подготовка научных кадров

Учебно-научный центр по физике и диагностике кристаллов

на базе НИЦ КМ ФИК РАН и МГТУ им. Н.Э. Баумана

Руководители д.ф.-м.н. В.И. Стрелов, д.ф.-м.н. Косушкин В.Г.
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

Организован на базе кафедры «Материаловедение» Калужского филиала Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана (МГТУ им. Н.Э. Баумана) и филиала ИК РАН Научно-исследовательского центра «Космическое материаловедение».

Основные научные направления деятельности НОЦ:

- рентгенодифракционная диагностика реальной структуры кристаллов;
- электронно-зондовые методы диагностики материалов микро - и наноэлектроники.



Подготовка научных кадров

Российско-Германский научно-образовательный центр «Оптическая, рентгеновская и фотоэлектронная спектроскопия с использованием синхротронного излучения»

Руководители с российской стороны:

член-корр. РАН М.В. Ковальчук и д.ф.-м.н. В.К. Адамчук (СПбГУ)

Головная организация - Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ),
соисполнители - ИК РАН и Российско-Германская лаборатория на BESSY (Берлин, Германия).

Основные научные направления деятельности НОЦ:

- проведение спектроскопических исследований в области физического материаловедения;
- разработка экспериментальных методов с использованием СИ;
- разработка учебных планов, программ спецкурсов и других материалов для обеспечения подготовки специалистов по специализации “Оптическая, рентгеновская и фотоэлектронная спектроскопия новых материалов нанозлектроники”;
- проведение лекций, семинаров и школ по использованию СИ для материаловедения с привлечением ведущих немецких и российских ученых.



Подготовка научных кадров

Школы (курсы) для молодых ученых 2012 г.

V Высшие курсы стран СНГ для молодых ученых, аспирантов и студентов по современным методам исследований наносистем и материалов «Синхротронные и нейтронные исследования наносистем»

(СИН-нано-2012, 17 июня - 5 июля 2012 г.)

Организаторы: ИК РАН, ОИЯИ (Дубна), НИЦ «Курчатовский институт» при поддержке Межгосударственного фонда гуманитарного сотрудничества государств-участников СНГ (МФГС).

Научная конференция выпускников Высших курсов стран СНГ для молодых ученых, аспирантов и студентов старших курсов по современным методам исследований наносистем и материалов «Синхротронные и нейтронные исследования наносистем»

(17 - 25 июня 2012 г.).

Организаторы: ИК РАН, ОИЯИ (Дубна), НИЦ «Курчатовский институт» при поддержке Межгосударственного фонда гуманитарного сотрудничества государств-участников СНГ (МФГС).



Деятельность СМУ ИК РАН

**Совет молодых ученых ИК РАН организован в 2002 году.
В 2012 году избран 6-й состав:**

Запорожец М.А. - председатель
Золотов Д.А. - зам. председателя
Кварталов В.Б.
Печникова Е.В.
Гребенев В.В.
Григорьева М.С.
Аксенов С.М.
Кускова А.С.
Алпатова А.В.

- участие в организации и проведении общеинститутских мероприятий (лекции и практикумы для молодых сотрудников ИК РАН, молодежные семинары, Высшие курсы стран СНГ 2012 г., научные чтения, защиты курсовых и дипломных работ студентов базовой кафедры, творческие вечера);
- обсуждение заявок на различные конкурсы научных работ;
- взаимодействие со СМУ РАН.



Премии и награды

Член-корр. РАН **Ковальчук М.В.**, член-корр. РАН **Нарайкин О.С.**, **Яцишина Е.Б.** - премия Правительства Российской Федерации 2012 года в области образования и присвоение звания "Лауреат премии Правительства Российской Федерации в области образования"

К.ф.-м.н. **Благов А.Е.** - премия Президента Российской Федерации в области науки и инноваций для молодых учёных за 2011 год

К.г.-м.н. **Аксенов С.М.** - медаль Российской академии наук в области геологии, геофизики, геохимии и горных наук

К.г.-м.н. **Аксенов С.М.** - премия Министерства образования и науки РФ для поддержки талантливой молодежи (по итогам форума Ломоносов-2012)

К.ф.-м.н. **Гребенев В.В.** - грант Президента Российской Федерации в области химии, новых материалов и химических технологий

Трушина Д.Б. - победитель программы «Участник молодежного научно-инновационного конкурса» («У.М.Н.И.К.») МФТИ

Степнова Е.Г. - первая премия на 64-ой научно-технической конференции студентов МИТХТ им. М.В. Ломоносова (секция "Материалы микро-, опто- и наноэлектроники. Физика и химия твердого тела")



Международное сотрудничество

12 совместных договоров о научно-техническом сотрудничестве

78 научных командировок (из них **35** - для участия в международных конференциях, конгрессах и выставках)

23 визита зарубежных ученых и специалистов

Участие в работе комиссий Международного союза кристаллографов
(Авилов А.С., Болотина Н.Б., Волков В.В., Дмитриенко В.Е., Самыгина В.Р.)

3 двусторонних российско-японских семинара с участием представителей Японского космического агентства JAXA и сотрудников японских фирм-производителей оборудования.

Заседание Управляющего Комитета Российско-Германской лаборатории (РГЛ) на источнике синхротронного излучения BESSY II, одним из учредителей которой является ИК РАН, *23 марта 2012 г.*



Международное сотрудничество

Национальный комитет кристаллографов России (НККР) Важнейшие совместные проекты:



Российско-германская лаборатория на синхротроне BESSY (Германия)



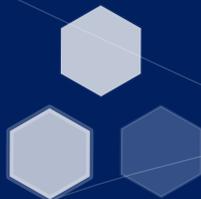
Лазер на свободных электронах XFEL (Германия)
- административно-финансовый комитет Европейского проекта XFEL
- Международный управляющий комитет Европейского проекта



Российско-германское сотрудничество в области фотонных наук (Photon sciences)



Российско-японская космическая программа по кристаллизации белков на МКС



Научно-организационные мероприятия

Проведено:

конференции - 2

школы (курсы) для молодых ученых - 2

научные чтения - 2

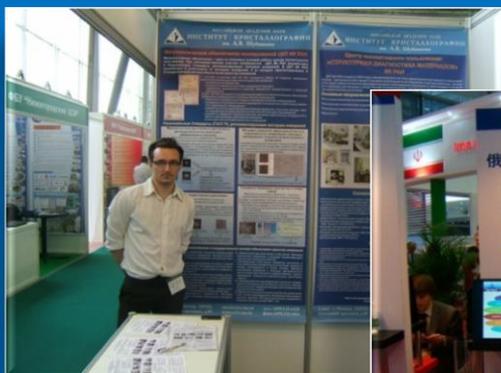
в том числе

- **Конференция стран СНГ по росту кристаллов (РК СНГ-2012)**
Харьков (Украина), 1 - 5 октября 2012 года
- **XXIV Российская конференция по электронной микроскопии (РКЭМ-2012)** Черноголовка, 29 мая - 1 июня 2012 г.
- **V Высшие курсы стран СНГ для молодых ученых, аспирантов и студентов по современным методам исследований наносистем и материалов «Синхротронные и нейтронные исследования наносистем» (СИН-нано-2012)**
Дубна-Москва, 17 июня - 5 июля 2012 г.



Выставки

- 8-й Московский международный форум «Точные измерения – основа качества и безопасности» MetroExpo-2012 (23-25 мая 2012 г., Москва).
- 12-й Международный экологический форум «Экология большого города» (20-23 марта 2012 г., Санкт-Петербург).
- Московский международный форум инновационного развития "Открытые инновации-2012" (31 октября-3 ноября 2012 г., Москва).
- Международная ярмарка высоких технологий China Hi-Tech Fair 2012 (16-21 ноября 2012 г., Шеньжень, Китай).





Развитие приборной базы

Оборудование, приобретенное в рамках госконтракта ФЦП (развитие ЦКП) и по гранту Президиума (Приборная база)

- Кварцевые микровесы QCM 200 5MHz QCM для измерения количества белка осажденного на подложку.
- Устройство плазменной чистки образцов Fischione Model 1020 Plasma Cleaner для электронной микроскопии и электронографии от различных загрязнений.
- Измеритель импеданса Alpha- A + ZG4 analyser.
- Модуль спектрометра для измерений характеристик полупроводниковых детекторов.
- Источники бесперебойного питания Riello MDT 60 50кВа для обеспечения непрерывной работы от сети и защиты от скачков напряжения универсального дифрактометра.





Оценка результативности



В 2011-12 гг. проводилась оценка результативности деятельности институтов Российской академии наук по итогам работы за 2007-2011 гг.

Согласно заключению комиссии:

- ИК РАН заслуживает **положительной оценки** по результатам оценки результативности своей деятельности и, в соответствии с установленными критериями, может быть отнесен к **первой категории**.