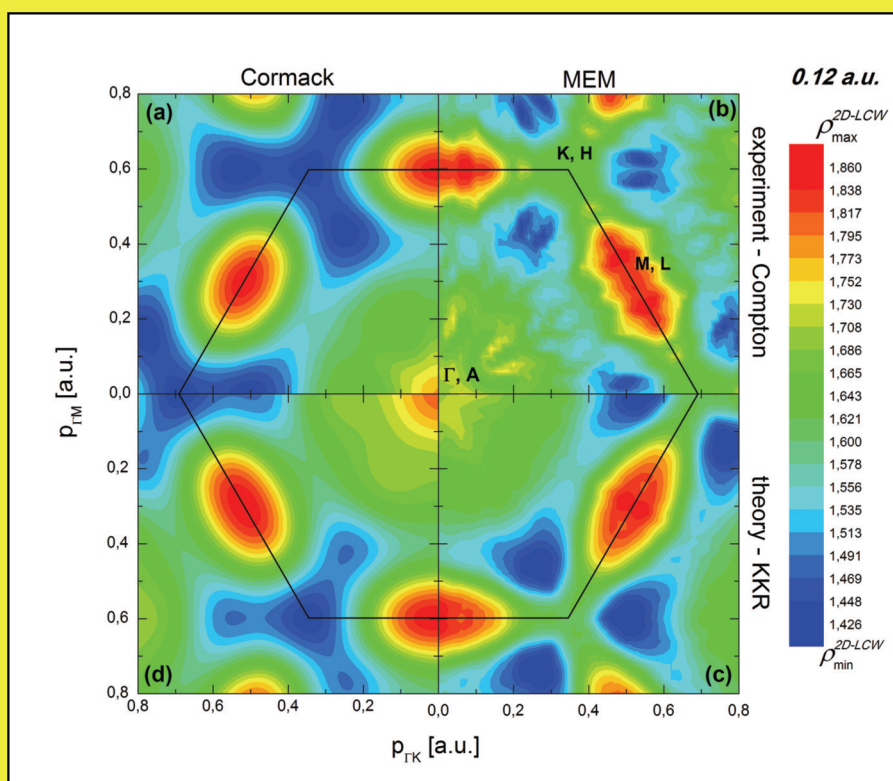


SYNCHROTRON RADIATION IN NATURAL SCIENCE

Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society
Volume 10, Number 1-2, September 2011



Includes: News, regular papers, information on PTPS,
Programme and Abstracts of the of the 9th National Meeting
of Synchrotron Radiation Users (KSUPS-9),
(Warsaw, Poland, 26-27 September, 2011)



Organised by: Polish Synchrotron Radiation Society
and Institute of Physical Chemistry PAS, Warsaw

Sponsored by: Ministry of Science and Higher Education
and PREVAC - PRECISION AND VACUUM TECHNOLOGY

SYNCHROTRON RADIATION IN NATURAL SCIENCE

Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society

Address: al. Lotników 32/46, 02-668 Warsaw, Poland, phone/fax (0) 228436034, e-mail: paszk@ifpan.edu.pl

Editor

Wojciech Paszkowicz
Institute of Physics
Polish Academy of Sciences
al. Lotników 32/46
02-668 Warsaw
e-mail: paszk@ifpan.edu.pl

Editorial Board

Andrzej Burian
Institute of Physics
Silesian University
ul. Uniwersytecka 4
40-007 Katowice
e-mail: burian@us.edu.pl

Edward A. Görllich
Institute of Physics
Jagellonian University
ul. Reymonta 4
30-059 Kraków
e-mail: edward.gorlich@uj.edu.pl

Krystyna Jabłońska
Institute of Physics
Polish Academy of Sciences
al. Lotników 32/46
02-668 Warsaw
e-mail: jablo@ifpan.edu.pl

Bogdan J. Kowalski
Institute of Physics
Polish Academy of Sciences
al. Lotników 32/46
02-668 Warsaw, Poland
e-mail: kowab@ifpan.edu.pl

Maciej Kozak
Faculty of Physics
A. Mickiewicz University
ul. Umultowska 85
61-614 Poznań
e-mail: mkozak@amu.edu.pl

Wojciech Kwiatek
Institute of Nuclear Physics
Polish Academy of Sciences
ul. Radzikowskiego 152
31-342 Cracow
e-mail: wojciech.kwiatek@ifj.edu.pl

Bronisław A. Orłowski
Institute of Physics
Polish Academy of Sciences
al. Lotników 32/46
02-668 Warsaw
e-mail: orbro@ifpan.edu.pl

Paweł Piszora
Faculty of Chemistry
A. Mickiewicz University
ul. Grunwaldzka 6
60-780 Poznań
e-mail: pawel@amu.edu.pl

Anna Wolska
Institute of Physics
Polish Academy of Sciences
al. Lotników 32/46
02-668 Warsaw
e-mail: wolska@ifpan.edu.pl

Danuta Żymierska
Institute of Physics
Polish Academy of Sciences
al. Lotników 32/46
02-668 Warsaw
e-mail: zymier@ifpan.edu.pl

Note for contributors: Contributions in English (preferred) or in Polish should be sent to the Editor. The topics include: synchrotron and alternative radiation sources, beamline instrumentation, experimental and theoretical results connected with application of various methods and approaches (x-ray scattering, x-ray diffraction, x-ray absorption, fluorescence and photoelectron spectroscopies, magnetic dichroism, etc.) in connection with application of synchrotron radiation in physics, chemistry, crystallography, materials science and life sciences.

Figure on the cover page: Illustration to the KSUPS abstract "Reconstruction of the 3D electron momentum density distribution in Mg by the maximum entropy method" by Brancewicz *et al.* (this issue).

SYNCHROTRON RADIATION IN NATURAL SCIENCE is published and distributed by the Polish Synchrotron Radiation Society (PSRS). Cover design by W. Paszkowicz.

Detailed information on PSRS is given on cover page 3.

Acknowledgements: This issue of the journal was sponsored by Ministry of Science and Higher Education (Poland) through the grant 838/P-DUN/2011

ISSN 1644-7190

Volume 10, No. 1-2, 2011, © Polish Synchrotron Radiation Society

.	CONTENTS		I
K. Ławniczak-Jabłońska, W. Paszkowicz	Czerwone światło na zawsze czy na chwilę? (o zawieszonym dostępie polskich uczonych do źródeł synchrotronowych)		V
	KSUPS-9 – 9th National Meeting of Synchrotron Radiation Users (KSUPS-9)		
Z. Kaszkur	Welcome		1
	KSUPS-9 – programme		2
	KSUPS-9 – Invited lectures (session 1)		
B. Czerny	Promieniowanie synchrotronowe prosto z nieba	L01	7
M. Gilski, M. Kazmierczyk, S. Krzywda, H. Zabranska, I. Pichova, F. Khatib, F. DiMaio, D. Baker, S. Cooper, Z. Popovic, M. Jaskólski	The first crystal structure of monomeric retroviral protease solved by online game players	L02	7
P. Grochulski, M.N. Fodje, G. George	Status and the future of structural biology at the Canadian Light Source	L03	8
J.B. Pelka	Nowe metody obrazowania i nanokrystalografii z wykorzystaniem koherentnych femtosekundowych impulsów rentgenowskiego lasera na swobodnych elektronach	L04	8
Ł. Hawelek, A. Bródka, V. Honkimaki, J.C. Dore, S. Tomita, A. Burian	Przemiana nanodiament-nanocebulki węglowe: badania metodą dyfrakcji wysokoenergetycznego promieniowania rentgenowskiego	L05	9
M.J. Stankiewicz, C.J. Bocchetta, P. Goryl, K. Królas, M. Młynarczyk, P. Tracz, Ł. Walczak, A. Wawrzyniak	SOLARIS – the National Synchrotron Radiation Centre at Jagiellonian University	L06	10
G. Wrochna	POLFEL – a high average power free electron laser	L07	10
	ISSRNS-10 – Poster presentations		
A. Baranowska-Korczyc, K. Fronc, B. Sikora, I. Kamińska, K. Sobczak, A. Reszka, K. Dybko, Ł. Kłopotowski, W. Paszkowicz, P. Dłużewski, B.J. Kowalski, D. Elbaum	ZnO and core/shell ZnO/ZnS nanofibers: Characterization and applications	P01	11
M. Brancewicz, E. Żukowski, A. Andrejczuk, M. Pylak, L. Dobrzyński	Reconstruction of the 3D electron momentum density distribution in Mg by the maximum entropy method	P02	11
J. Darul	Hydrothermal synthesis of layered double hydroxide-terephthalate intercalation compounds	P03	12
E. Dynowska, J. Domagała, P. Romanowski, E. Janik, P. Wojnar, W. Caliebe	Monocrystalline character of ZnMgTe shell in the core-shell ZnTe/ZnMgTe nanowires	P04ext	12
O. Ermakova, W. Paszkowicz, P. Piszora, R. Minikayev, E. Werner-Malento, S. Gierlotka, M. Berkowski, J.D. Fidelus, Y. Cerenius, S. Carlson	High-pressure diffraction study of structural and elastic properties of zircon-type and scheelite-type RVO ₄ (R = Nd, Eu)	P05	14

O. Ermakova, R. Minikayev, C. Lathe, H. Dabkowska, W. Paszkowicz	Elastic properties of dysprosium orthovanadate: An in-situ powder-diffraction study	P06	15
E. Guzewicz, M.I. Łukasiewicz, Ł. Wachnicki, K. Kopalko, M. Godlewski	Rezonansowe badania fotoemisyjne ferromagnetycznych warstw ZnCoO	P07ext	16
D. Klinger, R. Sobierajski, J. Pelka, E. Lusakowska, D. Zymierska, W. Wierzchowski, K. Wieteska, T. Balcer, J. Chalupsky, W. Hajkova, T. Burian, A.J. Gleeson, L. Juha, K. Tiedtke, S. Toleikis, H. Wabnitz, J. Gaudin	Damage of gallium arsenide created after irradiation by ultra-short VUV laser pulse	P08	17
M. Kowalik, W. Tokarz, R. Zalecki, A. Kołodziejczyk	Electronic band structure and magnetic properties of $\text{La}_{2/3}\text{Pb}_{1/3}\text{Mn}_{2/3}\text{Fe}_{1/3}\text{O}_3$	P09	18
K. Lawniczak-Jablonska, M.T. Klepka, A. Wolska, E. Dynowska, M.A. Borysiewicz	Optimization of technology for contact metallization in electronic devices – XRD and EXAFS studies	P10	19
K. Lawniczak-Jablonska, J. Bak-Misiuk, A. Wolska, M.T. Klepka, E. Dynowska, P. Romanowski, J. Sadowski	Can we control the process of room temperature ferromagnetic clusters formation in GaMnAs matrix?	P11	20
K. Lawniczak-Jablonska, J. Libera, A. Wolska, M.T. Klepka, A. Baranowska-Korczyn, K. Fronc, D. Elbaum	Location of metals in ZnO electrospined nanofibers	P12	21
K. Wieteska, W. Wierzchowski, A. Malinowska, S. Turczynski, M. Lefeld-Sosnowska, D.A. Pawlak, T. Łukasiewicz, C. Paulmann	Synchrotron topographic studies of domain structure in Czochralski grown $\text{Pr}_x\text{La}_{1-x}\text{AlO}_3$ crystals	P13	21
J.K. Nowak, F. Marone, A. Kuczumow	Application of synchrotron-radiation X-ray tomographic microscopy (SRXTM) to visualisation of petrified wood samples	P14	22
B.A. Orlowski, J. Pelka, P. Dziawa, S. Mickevicius, A. Reszka, B.J. Kowalski, S. Thiess, W. Drube	X-ray photoemission from CdTe/PbTe/CdTe nanostructure in normal and grazing-incidence modes	P15ext	23
R. Minikayev, W. Paszkowicz, P. Piszora, M. Knapp, C. Baehz	Thermal expansion of Si_3N_4 and Ge_3N_4	P16	25
A. Pietnoczka, R. Bacewicz, T. Slupinski, J. Antonowicz, S.-H. Wei	Local structure around Te in heavily doped GaAs:Te using X-ray absorption fine structure	P17	25
Z. Pietralik, M. Kozak	Studies of gemini surfactants as nanocarriers for siRNA	P18	26
Z. Pietralik, D. Wieczorek, R. Zieliński, M. Kozak	Interactions between zwitterionic surfactants and DMPC	P19	26
Z. Pietralik, A. Skrzypczak, M. Kozak	Structural changes of DMPC bilayers induced by gemini surfactants	P20	27
A. Reszka, B.A. Orlowski, Ł. Wachnicki, S. Gierałtowska, E. Guzewicz, B.J. Kowalski, M. Godlewski, R.L. Johnson	Resonant photoemission study of Sm atoms on ZnO surface	P21ext	28
J. Bak-Misiuk, P. Romanowski, E. Dynowska, A. Misiuk, J. Sadowski, W. Caliebe	Structural transformations of GaMnAs layer annealed under enhanced hydrostatic pressure	P22	29
R. Minikayev, E. Dynowska, T. Story, A. Szczerbakow, A. Bell, D.M. Trots, W. Szuszkiewicz	Low-temperature expansion of metastable $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ solid solution	P23ext	30
K. Turzyniecki	Proste wyjaśnienie mechanizmu powstawania promieniowania synchrotronowego	P24	31

A. Wierzbicka, J. Domagala, M. Sarzynski, D. Luebbert, Z.R. Zytkeiwicz	Investigation of strain and lattice parameters distribution in epitaxial laterally overgrown InGaN/GaN structures	P25	31
A. Wolska, M.T. Klepka, B.S. Witkowski, M.I. Łukasiewicz, E. Guziewicz, M. Godlewski	Mangan w warstwach ZnMnO hodowanych metodą osadzania warstw atomowych	P26	32
J. Antonowicz, A. Pietnoczka, T. Drobiazg, G.A. Almyras, D.G. Papageorgiou, G.A. Evangelakis	Atomic structure of Cu-Zr metallic glass assessed by EXAFS method and molecular dynamics simulations	P27	33
B.J. Kowalski, R. Nietubyc, J. Sadowski	Stany Mn 3d w paśmie walencyjnym Ga _{1-x} Mn _x Sb	P28	34
E. Wierzbicka, A. Malinowska, K. Wieteska, W. Wierzchowski, M. Lefeld-Sosnowska, M.A. Swirkowicz, T. Łukasiewicz, C. Paulmann	Characterization of the defect structure in gadolinium orthovanadate single crystals grown by the Czochralski method	P29	35
A. Shalimov, C. Baehtz, J. Grenzer, J.V. Borany	The Rossendorf beamline BM20 at the ESRF: Overview and perspectives	P30	35
M. Murawska, M. Kozak	Studies of the structure and morphology of gold nanoparticles in solution by TEM, SAXS and UV-vis	P31	36
M. Taube, J. Pieńkowska, A. Jarmołowski, M. Kozak	Small angle X-ray scattering studies of Sgt1 protein from <i>Hordeum vulgare</i>	P32	36
W. Kida, M. Kozak	Structural changes of DPPC bilayers induced by gemini surfactants	P33	37
B. Korczyk, A. Bartnik, H. Fiedorowicz	Ablacja i modyfikacja warstwy wierzchniej PVDF z wykorzystaniem promieniowania z zakresu EUV	P34	37
P. Piszora, J. Darul, W. Nowicki, C. Lathe, S. Carlson, Y. Cerenius	Structural properties and compressibility of spinels: More questions than answers	P35	38
A. Dowierciał, P. Wilk, A. Jarmuła, W. Rypniewski, B. Kierdaszuk, W. Rode	Crystal structures of mouse thymidylate synthase in complexes with inhibitor	P36	39
Ł. Węgrzyński, A. Bartnik, H. Fiedorowicz	Badanie laserowo-plazmowego źródła EUV do modyfikacji powierzchni polimerów	P37	39

**KSUPS-9 – Invited lectures (session 2) and oral
presentations**

M. Gilski	Processing and analysis of synchrotron diffraction images of protein crystals	L08ext	40
A. Wolska	Absorpcja promieniowania synchrotronowego kluczem do tajemnic nanoświata	L09	41
R. Sobierajski	Krótkofalowe lasery na swobodnych elektronach – oddziaływanie impulsów z materią stałą	L10	42
J. Sędzik	Nucleation, aggregation, crystallization and synchrotron radiation	L11	42
I.A. Kowalik, M.A. Niño, A. Locatelli, T.O. Menteş, A. Bonanni, T. Dietl, D. Arvanitis	Magnetyczna spektroskopia i spektro-mikroskopia na materiałach spintronicznych	L12	42
D. Wardecki, R. Przeniosło, A. Fitch, M. Bukowski, R. Hempelmann	Zmiany mikrostruktury nanokryształów chromu pod wpływem wygrzewania – badania metodą dyfrakcji promieniowania synchrotronowego	L13ext	43
K. Wolska, A. Wandzilak, M. Czyżycki, P. Wróbel, M. Szczerbowska-Boruchowska, D. Adamek, E. Radwańska, M. Lankosz	Investigation of iron and zinc oxidation state in different grades of human brain gliomas using XAFS spectroscopy	O01	45

A. Wierzbicka, Z.R. Zytkeiwicz, M. Sobanska, K. Klosek, E. Lusakowska	Influence of substrate on crystallographic quality of AlGaIn/GaN HEMT structures grown by MBE	O02	45
W. Wierzbowski, K. Wieteska, D. Klinger, R. Sobierajski, J. Pelka, D. Zymierska, T. Balcer, C. Paulmann	Evaluation of the depth extension of the damages induced by FLASH pulses in silicon crystals	O03	46
W. Wierzbowski, K. Wieteska, K.J. Mazur, K. Kościwicz, T. Balcer, W. Strupinski, C. Paulmann	Topographic and reflectometric investigation of 4H silicon carbide epitaxial layer deposited at various growth rates	O04	47
J. M. Kubacki, D. Kajewski, M. Wojtyniak, J. Szade, A. Köhl, C. Lenser, R. Dittmann, R. Waser, K. Schulte	Badanie absorpcji rentgenowskiej i rezonansowej fotoemisji w cienkich warstwach SrTiO ₃ domieszkowanych żelazem	O05ext	47
M. Sikora, P. Glatzel	Valence band of tungsten compounds probed using 2p5d RIXS	O06	48
A.M. Drzewiecka, M.T. Klepka, A. Wolska, A.E. Koziół	Struktura nowych kompleksów miedzi(II) i cynku(II) z pochodnymi benzofuranu – badania z wykorzystaniem absorpcji i dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego	O07ext	49
I. Sankowska, J. Domagała, O. Yefanov, A. Jasik, K. Regiński, O.H. Seeck	X-ray measurements of type II InAs/GaSb superlattice in a wide angular range using the P08 beamline at PETRAIII	O08	50
A. Wolska, M.T. Klepka, B.S. Witkowski, M.I. Łukasiewicz, E. Guziewicz, M. Godlewski	Lokalne otoczenie atomów kobaltu w cienkich warstwach ZnCoO	O07ext	51
	list of participants		55
	Authors index		61
	Synchrotron Light News		64
	Regular contributions		
M. Jaskólski	Krystalografia białek w kryształowej kuli		73
B.H. Toby, M.R. Suchomel	Mail-in synchrotron powder diffraction at the APS		77
	Varia		
A. Kisiel	Dwudziestolecie Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego – rocznicowe impresje		80
D. Żymierska, B.A. Orłowski	Jubileusz 20-lecia Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego		85
D. Żymierska	Z życia Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego		90
E. Talik, S. Krukowski, Z.R. Żytkeiwicz	Działalność Polskiego Towarzystwa Wzrostu Kryształów		93
Z. Kaszukur	Działalność Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego		96
	Information on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS'2012)		97

Czerwone światło na zawsze czy na chwilę? (o zawieszonym dostępie polskich uczonych do źródeł synchrotronowych)

Przez większą część minionej dekady polscy naukowcy mieli dostęp do europejskich źródeł synchrotronowych. Nie mając własnego synchrotronu ani narodowych linii pomiarowych zlokalizowanych w innych ośrodkach europejskich, nie my decydowaliśmy o przydziale czasu pomiarowego. Jedynym dużym ośrodkiem synchrotronowym, do którego Polska uzyskała pełny dostęp było Europejskie Laboratorium Promieniowania Synchrotronowego (ESRF) w Grenoble. Dostęp był tam ograniczony nie tylko przez konkursowy tryb oceny projektów, lecz i przez stosunkowo (w porównaniu do wielkości kraju) niewielki wkład Polski do budżetu ESRF (przyznawany czas jest tam proporcjonalny do wkładu, w tym wypadku jednoprocentowego) czy ogromną popularność niektórych narodowych linii pomiarowych skutkującą odrzucaniem większości nadsyłanych tam projektów zagranicznych. Z powodu tych ograniczeń, części ambitnych projektów badań nie udawało się zrealizować, niemniej jednak braliśmy udział w badaniach na światowym poziomie czy to w ramach projektów finansowanych przez UE, czy w ramach udziału w ESRF, czy wreszcie w ramach współpracy z kolegami z innych krajów.

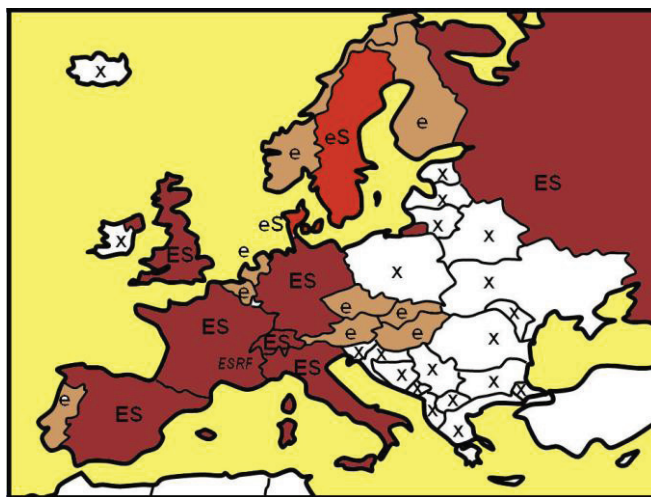
Niestety w lipcu tego roku sytuacja, do której byliśmy od lat przyzwyczajeni, uległa diametralnej zmianie. Skutki tych zmian odczuwamy bardzo boleśnie już niebawem. Projekt pod nazwą CECILIA, obejmujący dofinansowanie pomiarów realizowanych w europejskich ośrodkach synchrotronowych, złożony przez konsorcjum europejskich synchrotronów i laserów na swobodnych elektronach w programie FP7 nie uzyskał finansowania. Od września 2011 na nasze podróże na pomiary synchrotronowe musimy mieć własne środki. Co więcej po reformie systemu finansowania nauki MNiSW powiadomiło nas, że nie widzi w obecnym systemie ścieżki prawnej umożliwiającej wpłacanie naszego udziału do ESRF (pieniądze na ten cel są, jednak ministerstwo nie widzi możliwości prawnych podpisania umowy z ESRF). Po ocenach wielu ekspertów merytorycznego wykorzystania czasu pomiarowego w ESRF udział Polski w ESRF został wpisany na Polską mapę drogową rozwoju infrastruktury badawczej. Źródło to znajduje się również na europejskiej mapie rozwoju infrastruktury. Fakt ten w ocenie wniosków grantowych daje dodatkowe punkty. Ale nie ma obecnie odpowiedniego mechanizmu finansowania dla takiego projektu, więc kontynuowanie naszego udziału stoi pod dużym znakiem zapytania. Przez 7 lat spłacaliśmy koszty budowy tego urządzenia (spłaciliśmy już 1 417 320 euro). Spłacanie kosztów budowy kończy się za trzy lata, więc od roku 2014 nasza roczna składka byłaby istotnie mniejsza niż jest obecnie. Jeżeli wystąpimy z ESRF, pieniądze te przepadną. Dotychczasowa umowa wygasła z dniem 30 czerwca 2011. Ironią losu jest to, że nasz udział w bodajże najważniejszym wspólnym naukowym przedsięwzięciu krajów europejskich jakim jest ESRF został przerwany w dniu rozpoczęcia prezydentury polskiej w UE. W historii ESRF będzie to pierwszy przypadek kiedy kraj będący członkiem tego konsorcjum przerywa swój udział. ESRF bez naszych wpłat jakoś sobie poradzi, natomiast my nie będziemy mogli prowadzić badań na dotychczasowym poziomie bez dostępu do tego unikatowego źródła. Warto zauważyć, że ESRF (6 GeV, 1994 rok) to uznawane często za wiodące w świecie, pierwsze i systematycznie unowocześniane wysokoenergetyczne źródło trzeciej generacji (następne to ANL w USA, 1996 r., 7 GeV i SPring8, Japonia, 8 GeV, 1997 r., ostatnio dołączył do nich pierścień PETRA III w Hamburgu, 6 GeV, 2009 r.). Wiele badań, szczególnie dyfrakcyjnych, rozproszeniowych i tomograficznych można wykonać tylko w tych ośrodkach.

W chwili obecnej międzynarodowe konsorcjum synchrotronów i laserów przygotowuje kolejny wniosek do UE o dofinansowanie badań synchrotronowych i mamy nadzieję, że tym razem zostanie on pozytywnie oceniony. Organizacja środowiska użytkowników promieniowania synchrotronowego jest wzorem dla wielu innych środowisk korzystających z dużej infrastruktury badawczej (źródeł neutronów, laserów dużej mocy, radioteleskopów itp. Jest to największe środowisko naukowców w UE, oceniane w chwili obecnej na około 10 000 osób. Wydawałoby się, że wspieranie takiego środowiska powinno wpisywać się w politykę naukową UE, ponieważ spełnia wszystkie cele wypisane na sztafardowych dokumentach Unii. A jednak pozostawione zostało bez wsparcia finansowego.

Po usilnych staraniach dopuszczono synchrotrony do konkursu, który ogłoszono w lipcu 2011. Rozstrzygnięcie konkursu przewidziane jest w marcu 2012, a ewentualny projekt ruszyłby we wrześniu 2012. Do tego czasu musimy sobie radzić sami. Na spotkaniu Zarządu Europejskiej Organizacji Użytkowników Synchrotronów (ESUO – European Synchrotron Users Organization), z dyrektorami europejskich synchrotronów ustalono, że przez ten rok nie zostanie wprowadzona opłata za wiązkę synchrotronową dla zewnętrznych użytkowników (co zablokowałoby nam dostęp do synchrotronów całkowicie —

średni koszt jednej godziny wiązki to 200 Euro). Natomiast jedynie DESY zadeklarowało dofinansowanie kosztów pobytu (przejazd i zakwaterowanie) w DESY dla maksymalnie dwóch osób (zwykle potrzebne są trzy osoby do obsługi urządzeń w trybie całodobowym). Administracja pozostałych synchrotronów nie widzi możliwości dofinansowania kosztów pobytu użytkowników z innych krajów ze środków gospodarza.

Dostęp do synchrotronowych źródeł światła w Europie ewoluuje. Obecny stan przedstawiony jest na uproszczonej mapie (Rys. 1). W tym roku rusza synchrotron ALBA w Barcelonie, rozbudowywana jest PETRA III (Hamburg). Również w Hamburgu za kilka lat ruszy laser XFEL. W Danii już w przyszłym roku (mniej niż trzy lata od decyzji) ma być oddany drugi niskoenergetyczny synchrotron (ASTRID II), budowane są z rozmachem dwa pierścienie w Lund w Szwecji. Na tym tle mamy perspektywę uruchomienia w 2014 polskiego synchrotronu SOLARIS – średnioenergetycznego i jak dotąd prawie bez możliwości finansowych w zakresie zbudowania linii pomiarowych.



Rysunek 1. Dostęp krajów europejskich do synchrotronowych źródeł światła, stan na rok 2011. "ES (odcień ciemny)" kraje posiadające przynajmniej jeden synchrotron, będące udziałowcami ESRF na poziomie co najmniej 4%. "eS (odcień pośredni)" kraje posiadające przynajmniej jeden synchrotron, będące udziałowcami ESRF na poziomie 3% lub mniej. "e (odcień jasny)" – kraje nie posiadające synchrotronu, będące udziałowcami ESRF na poziomie 3% lub mniej. "X" - kraje nie posiadające synchrotronu, i nie będące udziałowcami ESRF.

Dwa lub więcej synchrotrony działają w Niemczech, Rosji, Szwecji i Włoszech). Synchrotron ALBA (Hiszpania) jest w tym roku w fazie rozruchu (pierwsza obserwacja promieniowania: 16 marca 2011). Niskoenergetyczny pierścień ASTRID II w Danii ma zostać uruchomiony razem z liniami pomiarowymi w 2012 i działać równolegle z istniejącym od wielu lat pierścieniem ASTRID I. Bardziej szczegółowe dane o działających europejskich synchrotronach i (często towarzyszącym im) laserach na swobodnych elektronach można znaleźć na stronach <http://www.elettra.eu/ELISA/index.php?n=Main.TransnationalAccessActivities>, <http://www.lightsources.org/cms/?pid=1000098>.

Jak pokazuje mapa, w Europie Zachodniej nie mają dostępu do źródeł synchrotronowych jedynie Irlandia, Islandia i Luksemburg, a w Europie Centralnej kraje bałtyckie, Białoruś, Ukraina, Mołdawia, kraje bałkańskie i Turcja. W Turcji ruszyła właśnie budowa niskoenergetycznego lasera na swobodnych elektronach i planuje się budowę synchrotronu. W klubie krajów "synchrotronowo rozwiniętych" byliśmy przez niecałą dekadę (7 lat). Tak więc w dwudziestym jubileuszowym roku działalności PTPS wracamy do punktu wyjścia. Dzisiaj jesteśmy lepiej zorganizowani, mamy rzeszę młodych i doświadczonych w zakresie pomiarów synchrotronowych naukowców, dlatego musimy rozpocząć usilne starania aby pokazać wartość i niezbędność badań z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego. Wierzmy, że nasze tegoroczne spotkanie pokaże najnowsze osiągnięcia w tych badaniach i pomoże w lobbowaniu na rzecz odblokowania dostępu do synchrotronów. Żyjemy głęboką nadzieją, że obecna sytuacja to tylko chwilowe utrudnienie w ruchu w czasie budowy nowej szerszej drogi a nie czerwone światło włączone na wiele lat.

Krystyna Jabłońska i Wojciech Paszkowicz

Welcome

9-te Krajowe Sympozjum Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego

Warszawa, 26-27 września 2011

organizowane przez

Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego
Instytut Chemii Fizycznej PAN

Komitet Organizacyjny

Dr hab. Zbigniew Kaszukur, prof. ndzw.PAN, Instytut Chemii
Fizycznej PAN w Warszawie, przewodniczący

Prof.dr hab. Wojciech Kwiatek, Instytut Fizyki Jadrowej PAN w
Krakowie, skarbnik

Dr hab. Wojciech Paszkowicz, prof.ndzw.PAN, Instytut Fizyki PAN
w Warszawie, edytor

Mgr Andrzej Jopek-Biliński, Instytut Chemii Fizycznej PAN w
Warszawie

inż. Andrzej Kosiński, Instytut Chemii Fizycznej PAN w

Warszawie

Dr inż. Mirosław Krawczyk, Instytut Chemii Fizycznej PAN w
Warszawie

Dr Bogusław Mierzwa, Instytut Chemii Fizycznej PAN w

Warszawie

Dr hab. Radosław Przeniosło, prof.ndzw.UW, Uniwersytet

Warszawski, Wydział Fizyki

Dr inż. Janusz W.Sobczak, Instytut Chemii Fizycznej PAN w
Warszawie

Mgr Ewa Trzetrzezińska, Instytut Chemii Fizycznej PAN w

Warszawie

Komitet Programowy

Prof. dr hab. Krystyna Ławniczak-Jabłońska (IF PAN, Warszawa) -
przewodnicząca

Prof. dr hab. Andrzej Burian (UŚ, Katowice)

Dr hab. Edward A. Görllich, prof.ndzw.PAN (UJ, Kraków)

Prof. dr hab. Aleksander Jabłoński (IChF PAN, Warszawa) -
członek honorowy

Dr hab. Bogdan Kowalski, prof.ndzw.PAN (IF PAN, Warszawa)

Dr hab. Maciej Kozak, prof.ndzw.UAM (UAM, Poznań)

Prof. dr hab. Bronisław Orłowski (IF PAN, Warszawa)

Dr hab. Wojciech Paszkowicz, prof.ndzw.PAN (IF PAN, Warszawa)

Dr hab. Paweł Piszora (UAM, Poznań)

Dr Anna Wolska (IF PAN, Warszawa)

Dr Danuta Żymierska (IF PAN, Warszawa)

Sponsorzy

Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego

PREVAC – Precision & Vacuum

Bruker Polska

-

-

-
-
Krajowe Sympozjum Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego jest poświęcone szeroko pojętym badaniom z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego. Celem konferencji jest prezentacja wyników prac naukowych uzyskanych z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego oraz popularyzacja idei pomiarów synchrotronowych, szczególnie wśród młodych badaczy. W ramach sympozjum planowane są wykłady, na których wybitni specjaliści z różnych ośrodków z całego kraju przedstawią przegląd metod stosowanych w badaniach z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego oraz najnowsze wyniki swoich badań.

Tegoroczne Sympozjum oprócz wykładów plenarnych i wystąpień dotyczących technik i wyników badań z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego będzie uzupełnione o okolicznościową sesję poświęconą XX urodzinom Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego oraz o praktyczne warsztaty zastosowania technik numerycznych do interpretacji danych pomiarowych mierzonych na synchrotronach. Warsztaty KSUPS 2011 będą poświęcone dwóm zagadnieniom. Po pierwsze, prof. Maurizio Benfatto (Laboratori Nazionali di Frascati dell'INFN) organizuje warsztaty pod roboczym tytułem "X-ray Absorption Near Edge Structure - Muffin Tin Model and beyond". Dotyczą one niestandardowych interpretacji pomiarów techniką XANES, wykraczających poza zastosowanie tzw. modelu Muffin Tin. Po drugie, prof. Václav Petricek (Instytut Fizyki Akademii Nauk, Praha, Republika Czeska) poprowadzi warsztaty poświęcone oprogramowaniu krystalograficznemu JANA2006.

Komitet Programowy i Organizacyjny 9 KSUPS dziękuje wszystkim uczestnikom za udział w Sympozjum. Życzymy owocnych obrad i miłego pobytu w Warszawie.

Przewodniczący Komitetu Organizacyjnego

Zbigniew Kaszukur

IX Krajowe Sympozjum Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego

Time	Duration	Type	Presenting person	Title
September 26th, Monday				
09:15	XX lat PTPS z perspektywy prezesów			
09:45	LECTURE			
09:45	00:30:00	Invited oral	Bożena Czerny	Promieniowanie synchrotronowe prosto z nieba
10:15	00:30:00	Invited oral	Mirosław Gilski	The first crystal structure of monomeric retroviral protease solved by online game players
10:45	COFFEE			
11:00	LECTURE			
11:00	00:30:00	Invited oral	Paweł Grochulski	Status and the future of structural biology at the Canadian Light Source
11:30	00:30:00	Invited oral	Jerzy B. Pełka	Nowe metody obrazowania i nanokrystalografii z wykorzystaniem koherentnych femtosekundowych impulsów rentgenowskiego lasera na swobodnych elektronach
12:00	00:30:00	Invited oral	Łukasz Hawelek	Przemiana nanodiamant-nanoczebulki węglowe: badania metodą dyfrakcji wysokoenergetycznego promieniowania rentgenowskiego
12:30	LUNCH			
14:00	LECTURE			
14:00	00:30:00	Invited oral	Marek J. Stankiewicz	SOLARIS – the National Synchrotron Radiation Centre at Jagiellonian University
14:30	00:30:00	Invited oral	Grzegorz Wrochna	POLFEL - A high average power free electron laser
15:00	COFFEE			
15:15	POSTER			
15:15	#1	Poster	Anna Baranowska-Korczyc	ZnO and core/shell ZnO/ZnS nanofibers: Characterization and applications
15:15	#2	Poster	Marek Brancewicz	Reconstruction of the 3D electron momentum density distribution in Mg by the maximum entropy method
15:15	#3	Poster	Jolanta Darul	Hydrothermal synthesis of layered double hydroxide-terephthalate intercalation compounds
15:15	#4	Poster	Elżbieta Dynowska	Monocrystalline character of ZnMgTe shell in the core-shell ZnTe/ZnMgTe nanowires

15:15	#5	Poster	Olga Ermakova	High-pressure diffraction study of structural and elastic properties of zircon-type and scheelite-type RVO_4 (R = Nd, Eu)
15:15	#6	Poster	Olga Ermakova	Elastic properties of dysprosium orthovanadate: An in-situ powder-diffraction study
15:15	#7	Poster	Elżbieta Guzewicz	Rezonansowe badania fotoemisyjne ferromagnetycznych warstw ZnCoO
15:15	#9	Poster	Dorota Klinger	Damage of gallium arsenide created after irradiation by ultra-short VUV laser pulse
15:15	#10	Poster	Marcin Kowalik	Electronic band structure and magnetic properties of $\text{La}_{2/3}\text{Pb}_{1/3}\text{Mn}_{2/3}\text{Fe}_{1/3}\text{O}_3$
15:15	#11	Poster	Krystyna Lawniczak-Jablonska	Optimization of technology for contact metallization in electronic devices - XRD and EXAFS studies
15:15	#12	Poster	Krystyna Lawniczak-Jablonska	Can we control the process of room temperature ferromagnetic clusters formation in GaMnAs matrix?
15:15	#13	Poster	Krystyna Lawniczak-Jablonska	Location of metals in ZnO electrospined nanofibers
15:15	#14	Poster	Agnieszka Malinowska	Synchrotron topographic studies of domain structure in Czochralski grown $\text{Pr}_x\text{La}_{1-x}\text{AlO}_3$ crystals
15:15	#15	Poster	Jakub K. Nowak	Application of synchrotron-radiation X-ray tomographic microscopy (SRXTM) to visualisation of petrified wood samples
15:15	#16	Poster	Bronislaw A. Orlowski	X-ray photoemission from CdTe/PbTe/CdTe nanostructure in normal and grazing-incidence modes
15:15	#17	Poster	Wojciech Paszkowicz	Thermal expansion of Si_3N_4 and Ge_3N_4
15:15	#18	Poster	Anna Pietnoczka	Local structure around Te in heavily doped GaAs:Te using X-ray absorption fine structure
15:15	#19	Poster	Zuzanna Pietralik	Studies of gemini surfactants as nanocarriers for siRNA
15:15	#20	Poster	Zuzanna Pietralik	Interactions between zwitterionic surfactants and DMPC
15:15	#21	Poster	Zuzanna Pietralik	Structural changes of DMPC bilayers induced by gemini surfactants
15:15	#22	Poster	Anna Reszka	Resonant photoemission study of Sm atoms on ZnO surface
15:15	#23	Poster	Przemysław Romanowski	Structural transformations of GaMnAs layer annealed under enhanced hydrostatic pressure

15:15	#24	Poster	Wojciech Szuszkiewicz	Low-temperature expansion of metastable $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ solid solution
15:15	#25	Poster	Kazimierz Turzyński	Proste wyjaśnienie mechanizmu powstawania promieniowania synchrotronowego
15:15	#26	Poster	Aleksandra Wierzbicka	Investigation of strain and lattice parameters distribution in epitaxial laterally overgrown InGaN/GaN structures
15:15	#27	Poster	Anna Wolska	Mangan w warstwach ZnMnO hodowanych metodą osadzania warstw atomowych
15:15	#28	Poster	Jerzy Antonowicz	Atomic structure of Cu-Zr metallic glass assessed by EXAFS method and molecular dynamics simulations
15:15	#29	Poster	Bogdan J. Kowalski	Stany Mn 3d w paśmie walencyjnym $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$
15:15	#30	Poster	Edyta Wierzbicka	Characterization of the defect structure in gadolinium orthovanadate single crystals grown by the Czochralski method
15:15	#31	Poster	Artem Shalimov	The Rossendorf beamline BM20 at the ESRF: Overview and perspectives
15:15	#32	Poster	Magdalena Murawska	Studies of the structure and morphology of gold nanoparticles in solution by TEM, SAXS and UV-vis
15:15	#33	Poster	Michał Taube	Small angle X-ray scattering studies of Sgt1 protein from <i>Hordeum vulgare</i>
15:15	#34	Poster	Wojciech Kida	Structural changes of DPPC bilayers induced by gemini surfactants
15:15	#35	Poster	Barbara Korczyk	Ablacja i modyfikacja warstwy wierzchniej PVDF z wykorzystaniem promieniowania z zakresu EUV
15:15	#36	Poster	Paweł Piszora	Structural properties and compressibility of spinels: More questions than answers
15:15	#37	Poster	Piotr Wilk	Crystal structures of mouse thymidylate synthase in complexes with inhibitor
17:00	Walne Zebranie PTPS			
18:30	BREAK			
September 27th, Tuesday				
09:00	LECTURE			
09:00	00:30:00	Invited oral	Mirosław Gilski	Processing and analysis of synchrotron diffraction images of protein crystals
09:30	00:30:00	Invited oral	Anna Wolska	Absorpcja promieniowania synchrotronowego kluczem do tajemnic nanoświata

10:00	00:30:00	Invited oral	Ryszard Sobierajski	Krótkofalowe lasery na swobodnych elektronach - oddziaływanie impulsów z materią stałą
10:30	COFFEE			
10:45	LECTURE			
10:45	00:30:00	Invited oral	Jan Sędzik	Nucleation, aggregation, crystallization and synchrotron radiation
11:15	00:30:00	Invited oral	Iwona A. Kowalik	Magnetyczna spektroskopia i spektro-mikroskopia na materiałach spintronicznych
11:45	00:30:00	Invited oral	Dariusz Wardecki	Zmiany mikrostruktury nanokryształów chromu pod wpływem wygrzewania – badania metodą dyfrakcji promieniowania synchrotronowego
12:15	00:15:00	Oral	Katarzyna Wolska	Investigation of iron and zinc oxidation state in different grades of human brain gliomas using XAFS spectroscopy
12:35	LUNCH			
14:00	LECTURE			
14:00	00:15:00	Oral	Aleksandra Wierzbicka	Influence of substrate on crystallographic quality of AlGaIn/GaN HEMT structures grown by MBE
14:20	00:15:00	Oral	Wojciech Wierzchowski	Evaluation of the depth extension of the damages induced by FLASH pulses in silicon crystals
14:40	00:15:00	Oral	Krystyna J. Mazur	Topographic and reflectometric investigation of 4H silicon carbide epitaxial layer deposited at various growth rates
15:00	00:15:00	Oral	Jerzy M. Kubacki	Badanie absorpcji rentgenowskiej i rezonansowej fotoemisji w cienkich warstwach SrTiO ₃ domieszkowanych żelazem
15:20	00:15:00	Oral	Marcin Sikora	Valence band of tungsten compounds probed using 2p5d RIXS
15:40	00:15:00	Oral	Aleksandra M. Drzewiecka	Struktura nowych kompleksów miedzi(II) i cynku(II) z pochodnymi benzofuranu – badania z wykorzystaniem absorpcji i dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego
16:00	00:15:00	Oral	Iwona Sankowska	X-ray measurements of type II InAs/GaSb superlattice in a wide angular range using the P08 beamline at PETRAIII
16:20	00:15:00	Oral	Anna Wolska	Lokalne otoczenie atomów kobaltu w cienkich warstwach ZnCoO
16:40	COFFEE			
17:00	Workshops			
20:00	BREAK			

Book of Abstracts: Title page

Published September 2011,
Copyright © 2011 pielaszek research

Disclaimer

The copyright of the cover pages, editorial and the second part of the book starting from page 64 belongs to Polish Synchrotron Radiation Society.

Revision: 44.0.40, 2011-09-19 22:55 GMT

Programme

Monday, 26 September

XX lat PTPS z perspektywy prezesów

Monday morning, 26 September, 9:15

LECTURE

Monday morning, 26 September, 9:45

9:45

Invited oral

Promieniowanie synchrotronowe prosto z nieba

Bożena Czerny

*Centrum Astronomiczne im. Mikołaja Kopernika (CAMK),
Bartycka 18, Warszawa 00-716, Poland*

e-mail: bcz@camk.edu.pl

Wytwarzanie promieniowania synchrotronowego w laboratoriach wymaga specjalistycznych urządzeń. A Wszechświat wytwarza je bez problemu. Astronomia zna wiele źródeł takiego promieniowania - od korony słonecznej poprzez gwiazdy, takie jak pulsary, mgławice, takie jak pozostałości po wybuchu supernowej, przez okolicę czarnej dziury w jądrze naszej Galaktyki aż do odległych radiogalaktyk i kwazarów. Obserwacje tego promieniowania prowadzi się w szerokim zakresie widmowym, od radio do zakresu rentgenowskiego. Badanie tego promieniowania pozwala oceniać warunki panujące w badanych obiektach, a czasami stanowi zapis historii tych obiektów. Wiele aspektów przyspieszania cząstek, odpowiedzialnych za obserwowaną emisję synchrotronową, pozostaje jednak jeszcze do wyjaśnienia.

10:15

Invited oral

The first crystal structure of monomeric retroviral protease solved by online game players

Mirosław Gilski^{1,2}, Maciej Kazmierczyk¹, Szymon Krzywdą¹, Helena Zabranska³, Iva Pichova³, Firas Khatib⁴, Frank DiMaio⁴, David Baker⁴, Seth Cooper⁵, Zoran Popovic⁵, Mariusz Jaskólski^{1,2}

1. *Department of Crystallography, Faculty of Chemistry, A. Mickiewicz University, Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland* **2.** *Center for Biocrystallographic Research, Institute of Bioorganic Chemistry, PAS, Noskowskiego 12/14, Poznań 61-704, Poland* **3.** *Czech Academy of Sciences, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Flemingovo n. 2, Prague 16610, Czech Republic* **4.** *University of Washington, Deptment of Biochemistry, Box 357350, Seattle, WA 98195, United States* **5.** *University of Washington, Deptment of Computer Science and Engineering, Box 352350, Seattle, WA 98195, United States*

e-mail: mirek@amu.edu.pl

Mason-Pfizer Monkey Virus (M-PMV) causes acquired immunodeficiency syndrome (AIDS) in rhesus monkeys. As in all retroviruses,

such as HIV-1, dimerization of its protease (PR) is a obligatory for processing of retroviral polypeptides and virion maturation. All previously determined crystal structures of retroviral proteases show interlaced dimers, representing the proteolytically active enzyme. Retroviral PR (retropepsin) is an unusual homodimeric form of aspartic protease, composed of two protein chains, each contributing a DTG triad to the catalytic center. The active site is covered by two symmetric loops called flaps. Structure-based design of protease inhibitors has led to a number of drugs used in the clinical treatment of AIDS. However their effectiveness is limited because the HIV virus is able to mutate quickly into a drug-resistant forms thus it is necessary to search for new methods of antiretroviral therapy.

An interesting approach would be to block the mandatory dimerization of the protease. Biophysical and NMR studies have indicated that in the absence of a substrate/inhibitor, M-PMV PR should fold into a stable monomer. The retroviral protease of M-PMV indeed crystallizes as a monomer, but despite the availability of several crystal forms, the crystal structure of this protein could not be solved and over a decade has resisted all molecular replacement efforts. Finally, the protein folding puzzle was presented to players of the computer game named Foldit who were challenged with the task to fold the polypeptide chain of the protein.

Foldit is a multiplayer online computer game in which players try to most accurately predict protein structures using human three-dimensional problem-solving skills. They collaborate with teammates while competing with other players to obtain the highest scoring (lowest energy) model. During the three weeks in which the puzzle was active, Foldit players generated over one million of structure model predictions. Finally the monomeric structure of M-PMV was solved by molecular replacement software, using one of the models constructed by Foldit players team Contenders.

The new structure indeed shows a monomeric protein with the termini completely disordered but the flap loop can be clearly identified in the electron density map. The flap has a completely new conformation with an unusual shape and orientation, different from both the open and closed states known from other retropepsins. Thanks to the original idea of the authors of Foldit, and to surprising intuition and three-dimensional skills of anonymous gamers, an important scientific problem could be finally solved. The structure of monomeric retropepsin determined at high resolution provides valuable extra information for the design of dimerization inhibitors that might help in development of new drugs for the treatment of retroviral infections, including AIDS.

COFFEE

Monday morning, 26 September, 10:45

LECTURE

Monday morning, 26 September, 11:00

11:00

Invited oral

Status and the future of structural biology at the Canadian Light Source

Paweł Grochulski, Michel N. Fodje, Graham George

Canadian Light Source University of Saskatchewan Saskatoon
Canada, Saskatoon S7N0X4, Canada

e-mail: Pawel.Grochulski@lightsource.ca

The Canadian Macromolecular Crystallography Facility (CMCF) together with the Biological X-ray Absorption Spectroscopy (BioXAS) facility form a suite of beamlines allowing Canadian researchers to conduct cutting edge research in structural biology at the Canadian Light Source (CLS). The CLS is a 2.9 GeV national synchrotron radiation facility located at the University of Saskatchewan in Saskatoon. The CMCF consists of 08ID-1 and 08B1-1 beamlines and it provides service to more than 60 Principal Investigators in Canada and the United States [1]. Up to 25% of the beam time is devoted to commercial users and the general user program is guaranteed up to 55% of the useful beam time and is run under a peer-review proposal system. The CMCF staff provides "Mail-In" crystallography service to the users with the highest scored proposals. Beamlines are equipped with very robust end-stations including on-axis visualization systems and Rayonix 300 CCD series detectors. They are each complemented with a Stanford automounter (SAM) allowing remote control of the beamlines. *MxDC*, an in-house developed beamline control system, is integrated with a data processing module, *AutoProcess*, allowing full automation of data collection and data processing with minimal human intervention [2]. It also allows remote control of experiments through interaction with a Laboratory Information Management System (LIMS) that was developed at the facility. The number of scientific papers for which data were collected at the 08ID-1 beamline exceeds 70 at present, and the number of PDB entries exceeds 160 structures.

X-ray spectroscopy (XAS) contributes to structural biology in two ways. It can provide information on species for which crystal structures are not available and it can also provide supplemental information on systems for which crystal structures are available. Since about 30% of the human genome is made up of genes encoding metalloproteins, XAS, but in particular the extended X-ray absorption fine structure (EXAFS), is extremely useful to study the geometry of the metal's vicinity within a radius of 5 Å. Its major strength is that very accurate values for bond lengths can be obtained, typically to better than ± 0.02 Å, which is comparable to accuracies obtained for small-molecule structures. These values are about ten times more accurate than those obtained from a typical protein crystallography experiment at a moderate resolution [3]. In EXAFS experiments multiple scattering (MS) occurs when multiple atoms backscatter photoelectrons. In this case, interference between the different backscattered waves can make the EXAFS sensitive to the relative arrangement of the atoms including some information on bond angles. Therefore the CMCF 08B1-1 beamline has been recently equipped with a four-element solid state detector, VORTEX-ME4, to perform EXAFS studies on protein crystals. Additionally, the BioXAS facility has been designed and is being built. It will be composed of two beamlines allowing the study of biological and health-related metals. These are important in diseases such as

Alzheimer's, environmental toxins, in metal-containing drugs, and as essential constituents of living systems.

1. Grochulski, P., Fodje, M.N., Gorin, J., Labiuk, S.L., and Berg, R. (2011) 08ID-1 Beamline, the Prime Beamline at the Canadian Macromolecular Crystallography Facility. *J. Appl. Cryst.* In press.
2. Fodje, M. N., Berg, R., Black, G., Grochulski, P., & Janzen, K. (2010). Automation of the Macromolecular Crystallography Beamlines at the Canadian Light Source. *PCaPAC*, (pp. 130-132). Saskatoon.
3. DePristo, M.A., de Bakker, P.I.W. and Blundell, T.L. (2004) Heterogeneity and Inaccuracy in Protein Structures Solved by X-ray Crystallography. *Structure* **12**, 831–838.

11:30

Invited oral

Nowe metody obrazowania i nanokrystalografii z wykorzystaniem koherentnych femtosekundowych impulsów rentgenowskiego lasera na swobodnych elektronach

Jerzy B. Pelka

Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników
32/46, Warszawa 02-668, Poland

e-mail: pelkay@ifpan.edu.pl

Jak wiadomo, rozdzielczość metod dyfrakcji i obrazowania wykorzystujących promieniowanie rentgenowskie ograniczona jest w sposób fundamentalny przez uszkodzenia radiacyjne. W przypadku obrazowania obiektów aperiodycznych zniszczenia wskutek radiacji uniemożliwiają zwykle zarejestrowanie obrazu o rozdzielczości porównywalnej z długością fali. W przypadku dyfrakcji omija się tę trudność dzięki zwielokrotnieniu „obektu badań” – komórki elementarnej w periodycznej strukturze kryształu. Przy odpowiednio dużym kryształku pozwala to odtworzyć przestrzenne ułożenie atomów bazy. Dla kryształów białkowych wykazano, że minimalna liczba komórek elementarnych niezbędnych do odtworzenia przestrzennej struktury białka z rozdzielczością atomową jest rzędu 10^{17} . Niestety, szacuje się, że trudności w wyhodowaniu odpowiedniej jakości kryształów molekularnych dotyczą aż ok. 40% białek, w tym np. większości szczególnie trudnych do krystalizacji białek transmembranowych, z którymi oddziałuje ponad 70% znanych obecnie leków. Z około 60 tys. struktur zgromadzonych w PDB tylko około setka należy do tej grupy.

Sytuację radykalnie może tu zmienić wprowadzenie nowych metod wykorzystujących koherentne rentgenowskie obrazowanie dyfrakcyjne (CXDI). Korzystają one z silnych femtosekundowych impulsów generowanych przez lasery na swobodnych elektronach, (FEL) - nowe źródła synchrotronowego promieniowania rentgenowskiego. Wykazano doświadczalnie, że za pomocą ultrakrótkiego, rzędu 10 fs, impulsu rentgenowskiego o mocy szczytowej dochodzącej do kilku GW można zrekonstruować dwuwymiarowy obraz obiektu o rozmiarach submikronowych lub pojedynczej makromolekuły rejestrując obraz dyfrakcyjny, zanim badany obiekt ulegnie całkowitemu zniszczeniu. Do wyznaczenia struktury przestrzennej białka wystarczy strumień niezwiązanych z

sobą molekuł, nie jest więc wymagany materiał badawczy w postaci skryzalizowanej.

W ostatnich latach potwierdzono eksperymentalnie zasadnicze założenia technik obrazowania i nanokrytalografii opartych na CXDI, korzystając m. in. z laserów na swobodnych elektronach FLASH w Hamburgu oraz LCLS na Uniwersytecie Stanforda. Już w pierwszych eksperymentach na tych urządzeniach uzyskano rozdzielczość porównywalną z długością fali źródła. Celem wykładu jest prezentacja nowych metod wykorzystujących CXDI, dotychczasowych rezultatów doświadczalnych, a także przedstawienie kluczowych wyzwań stojących przed rozwojem tych pionierskich technik. Wykład ilustrują m. in. obrazy CXDI otrzymane dla nanostruktur, komórek i wirusów.

Możliwość badania struktury dowolnych białek stała się istotną przesłanką decyzji o budowie europejskiego rentgenowskiego lasera na swobodnych elektronach XFEL w Hamburgu, który rozpocznie pracę pod koniec 2014 r. W przedsięwzięciu tym bierze także udział Polska.

12:00

Invited oral

Przemiana nanodiament-nanocelulki węglowe: badania metodą dyfrakcji wysokoenergetycznego promieniowania rentgenowskiego

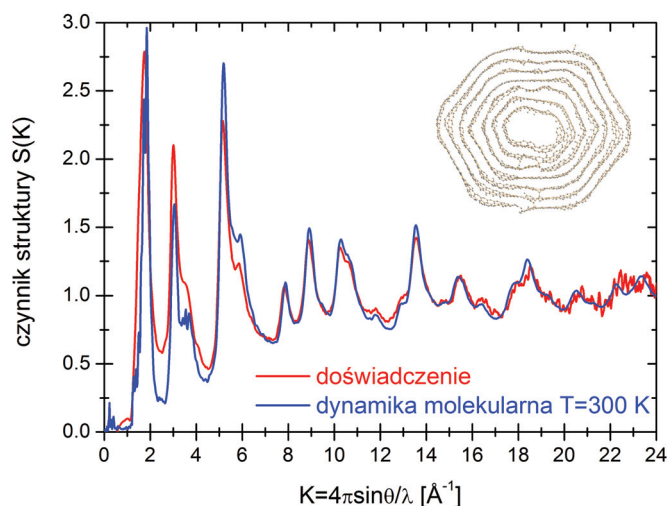
Łukasz Hawelek^{1,2}, Aleksander Bródka¹, Veijo Honkimäki⁴, John C. Dore³, Satoshi Tomita⁵, Andrzej Burian¹

1. University of Silesia, Institute of Physics, Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland 2. Institute of Nonferrous Metals, Sowińskiego 5, Gliwice 44-100, Poland 3. University of Kent, Canterbury CT2 7NR, United Kingdom 4. European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), 6, Jules Horowitz, Grenoble 38000, France 5. Graduate School of Materials Science, Nara Institute of Science and Technology, Nara 630-0192, Japan

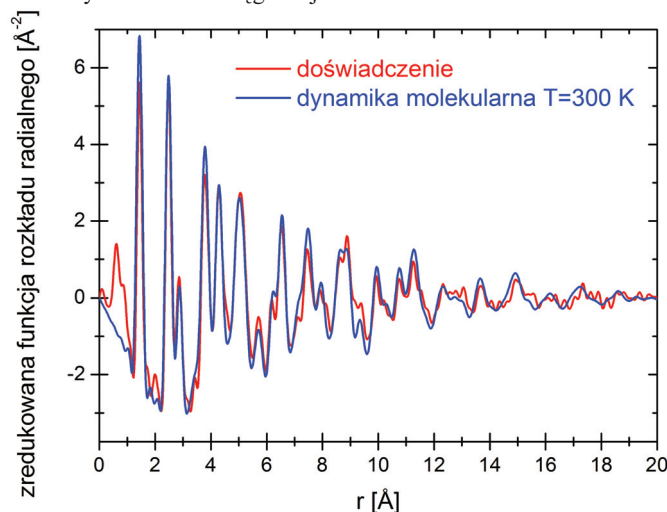
e-mail: lukasz.hawelek@us.edu.pl

W niniejszej pracy przedstawione zostaną wyniki badań przemiany strukturalnej nanodiamentów o średnicy ok. 47 Å w nanocelulki węglowe w wyniku obróbki wysokotemperaturowej. W badaniach tych zastosowano metodę dyfrakcji wysokoenergetycznego promieniowania synchrotronowego oraz symulacji komputerowych dynamiki molekularnej (DM) z wykorzystaniem potencjału REBO (Reactive Bond Order Potential) [1]. W trakcie procesu transformacji (tzw. grafityzacji) struktury celulkowe przyjmują kształt sferyczny, a ich finalna forma przybiera kształt nanocząstek wielościennych oraz sferycznych z zamkniętymi powłokami, zbliżonymi do struktur fulerenowych. Tworzenie się wydłużonych nanocząstek wielościennych może być wyjaśnione przez występowanie wyjściowych nanodiamentów w formie aglomeratów nanodiamentowych. W celu zbadania procesu grafityzacji nanodiamentów dla modelu nanodiamentu z pojedynczym diamentopodobnym rdzeniem (~5460 atomów węgla) oraz dla modelu nanodiamentu ze zbliżonym rdzeniem (~13500 atomów węgla) przeprowadzone zostały symulacje DM w temperaturze pokojowej. Następnie dla tej samej liczby atomów, dla obu przypadków, wygenerowano modele atomowe dla dwóch strukturalnych stanów pośrednich w temperaturze 1673 K i 1973 K oraz dla stanu końcowego struktury posiadającej zdeformowane ikozaedryczne

fulereny w temperaturze 2273 K. Dla generowanych, a następnie zoptymalizowanych modeli obliczone zostały teoretyczne natężenia i dalej zredukowane funkcje rozkładu radialnego. Poprawność proponowanych modeli została zweryfikowana poprzez porównanie wyników teoretycznych z doświadczalnymi zarówno w przestrzeni odwrotnej jak i rzeczywistej. Na rysunku 1 przedstawiono teoretyczny czynnik struktury dla modelu nanocelulki węglowej otrzymanej w temperaturze 2273 K w porównaniu z danymi doświadczalnymi, a na rysunku 2 porównano otrzymany model z doświadczeniem w przestrzeni rzeczywistej. Proponowane przez nas modele nanodiamentu oraz



Rys. 1. Porównanie teoretycznego czynnika struktury z danymi doświadczalnymi dla nanocelulek węglowych otrzymanych temperaturze 2273 K. We wstawce przedstawiono przekrój przez model atomowy nanocelulki węglowej.



Rys. 2. Porównanie teoretycznej zredukowanej funkcji rozkładu radialnego z danymi doświadczalnymi dla nanocelulek węglowych otrzymanych temperaturze 2273 K.

nanocelulek węglowych potwierdzają wcześniejsze obserwacje badanych struktur wykonane przy użyciu transmisyjnego mikroskopu elektronowego [2] oraz nowe podejście do opisu procesu grafityzacji nanocząsteczek diamentowych.

Referencje

[1] D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B.

Ni, S.B. Sinnott, A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, J Phys: Condens Matter 14 (2002) 783-802.

[2] S. Tomita, A. Burian, J.C. Dore, D. LeBolloch, M. Fujii, S. Hayashi, Diamond nanoparticles to carbon onions transformation: X-ray diffraction studies, Carbon 40 (2002) 1469-1474.

LUNCH

Monday afternoon, 26 September, 12:30

LECTURE

Monday afternoon, 26 September, 14:00

14:00

Invited oral

SOLARIS – the National Synchrotron Radiation Centre at Jagiellonian University

Marek J. Stankiewicz, Carlo J. Bocchetta, Piotr Goryl, Krzysztof Królas, Michał Młynarczyk, Piotr Tracz, Łukasz Walczak, Adriana Wawrzyniak

National Synchrotron Radiation Centre Solaris, Uniwersytet Jagielloński, Gronostajpwa 7/P1.6, Kraków 30-387, Poland

e-mail: m.j.stankiewicz@uj.edu.pl

The current status of the Solaris project - the Polish synchrotron radiation facility, situated at the Jagiellonian University new campus in Kraków will be presented. The project is based on the design of the new 1.5 GeV, 96 m circumference, 500 mA storage ring being concurrently built for the MAX IV project in Lund, Sweden. The ring is composed of 12 integrated magnet blocks forming a 12 double bend achromatic structures made from the iron blocks machined to high precision. They contain all magnetic elements allowing for a very compact design, technology developed and tested by MAX-lab experts. The magnets design is at the final stages of completion and is being performed in parallel with the design activities of the storage ring vacuum envelope. The iron for the Solaris magnets has been already purchased and is being thermally treated prior to machining. The magnet structures will be separated by 3.5 m long straight sections allowing for future installation of up to 10 insertion devices. Installation of 10-15 beamlines with associated experimental end-station is foreseen. The ring will be fed by 600 MeV linear accelerator, which is planned to be upgraded to provide full 1.5 GeV injection. The high power modulators with the corresponding klystrons powering the linac sections have been ordered and the contract for the linac accelerating sections is being finalized. Negotiations for delivery of RF cavities for the storage ring are the concluding stages.

Current	500 mA
Circumference	96 m
Horizontal emittance (bare lattice)	6 nm rad
Coupling	1%
Tunes Q_x, Q_y	11.22, 3.14
Natural chromaticities ξ_x, ξ_y	-22.9, -17.1

Current	500 mA
Momentum compaction	$3.04 \cdot 10^{-3}$
Momentum acceptance	4%

The contract for the design and construction of the Solaris building was awarded to the ALPINE Construction Polska Spółka z o.o. and Przedsiębiorstwo Budowlano-Produkcyjne ŁĘGPRZEM Spółka z o.o. in the March 2011. The design of the building is at the final stages and application for the building permit is expected by the end of September. Ground breaking, following building approval, is foreseen for early 2012. The building is composed of a linac tunnel and an adjacent modulator and service gallery placed below the storage ring level. The length of the tunnel ~100 m, within the constraints of land availability, foresees an upgrade to the linac to increase its energy for top-up injection. All services, power, HVAC and cooling will be built with this upgrade in mind. The experimental hall for beamlines houses the storage ring tunnel. The experimental hall has a surface area of 3000 m² and provision is made for its future extension on one side by 600 m².

14:30

Invited oral

POLFEL - A high average power free electron laser

Grzegorz Wrochna

The Andrzej Soltan Institute for Nuclear Studies (IPJ), Otwock-Świerk 05-400, Poland

e-mail: Grzegorz.Wrochna@fuw.edu.pl

A construction of high average power free electron laser represents an interesting scientific initiative for the wide range of users. Physicists, chemists, biologists, material engineers search for the light which combines several properties: coherence, brightness, high average intensity, short pulse duration and wide range of tuneability which are achievable apart, but never at the same experimental station. Such a beam would enable new advanced experiments and facilitate the exploration of phenomena inaccessible in other way. To launch and operate such a source is also a scientific challenge for accelerator physicists who are currently involved in a development of crucial technological solutions particularly in the domain of superconducting photo-injectors and continuous wave RF suppliers.

We propose to settle a high average power THz – VUV FEL facility POLFEL at the newly established National Centre for Nuclear Research in Świerk. POLFEL is planned as a node of the EuroFEL network of complementary facilities, recommended by ESFRI. The great weight of the synchrotron radiation studies in modern science and technology makes us recognize the next, fourth generation light source facility as an instrument which will effectively improve the impact of research being run in Poland. Presented concept benefits from the long and wide experience of Polish scientists and engineers involved in the FEL activities world wide.

Polfel will be built in three stages. The first of them consists of electron injector and short 10 MeV linac, which produces radiation in the terahertz frequency domain. The most important task in that stage will be to establish and get mature a continuous wave operation mode of fully superconducting accelerator. That accomplishment will be followed by the linac extension up to several tens of

megaelectronvolts, which will bring the light in the wavelength ranged up to visible domain.

COFFEE

Monday afternoon, 26 September, 15:00

POSTER

Monday afternoon, 26 September, 15:15

15:15

Poster

1

ZnO and core/shell ZnO/ZnS nanofibers: Characterization and applications

Anna Baranowska-Korczyńska, Krzysztof Fronc, Bożena Sikora, Izabela Kamińska, Kamil Sobczak, Anna Reszka, Krzysztof Dybko, Łukasz Kłopotowski, Wojciech Paszkowicz, Piotr Dłużewski, Bogdan J. Kowalski, Danek Elbaum

Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

e-mail: akorczy@ipfan.edu.pl

One-dimensional zinc oxide (ZnO) nanostructures are of interest because of their potential applications in electronics and optoelectronics. We synthesized ceramic ZnO nanofibers. The first step was to form the nanofibers by electrospinning technique using a suspension of zinc acetate in poly(vinyl alcohol) (PVA) as precursor. These composite one-dimensional nanostructures were calcined in air (400°C - 900°C) in order to remove organic components and obtain ZnO nanofibers [1]. Then, we synthesized ZnS shell on the ZnO nanofiber by the hydrogen sulphide treatment. Structural and chemical characterization was performed by X-ray diffraction (XRD), Transmission Electron Microscopy (TEM), Electron Energy Loss Spectroscopy (EELS), Scanning Electron Microscopy (SEM), Energy Dispersive X-ray Spectroscopy (EDX) and Atomic Force Microscopy (AFM). Additionally, optical characterization was done by a photoluminescence (PL) and cathodoluminescence measurements. The studies revealed nanofibers diameters ranging from 100 to 300 nm. Moreover, the nanofibers consisted of ZnO wurtzite crystals. The activation energy for the crystal-growth was estimated to be 12 kJ/mol. The average crystal diameter was 6.3 nm for nanofibers calcined at 500°C. Increased ZnO crystal sizes (Fig. 1) and intensity of the band gap emission were observed for higher calcination temperatures. The ZnS shell consisted of about 2 nm cubic crystals. We find that the light is emitted uniformly from all the fibers. Both CL and PL spectra, consist of two emission bands. One, centered around 380 nm, is related to the interband recombination. The other one centered around 550 nm is a defect band, and most probably originates from oxygen vacancies.

The nanofibers can be applied to construct sensors and bio-sensors [2]. The Field Effect Transistors (FETs) based on semiconducting electrospun nanofibers are very promising real-time detectors. The nanofibers for FETs were calcined at 500° C for 4 h. We observed the current increase when the nanofibers were immersed in liquids (water and ethanol). Moreover, the current increased by three orders of magnitude when the nanofibers were exposed to the light (325 nm). For fabrication of biosensors based on the ZnO nanofibers, a

surface passivation is required. In order to do that we synthesized core/shell ZnO/ZnS nanofibers and prepared a FET based on these fibers for biosensing applications.

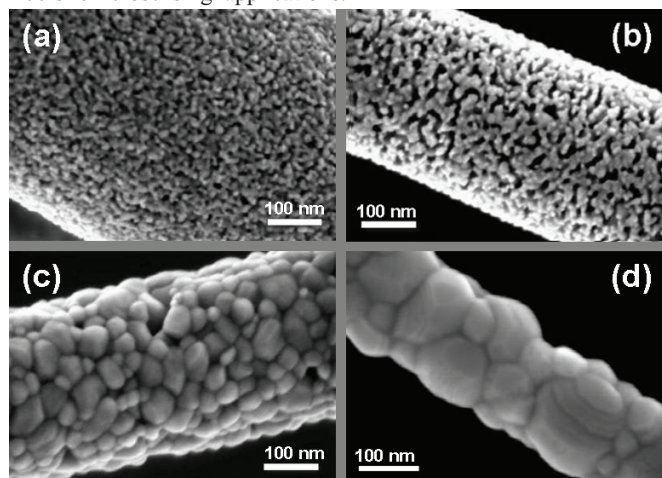


Fig. 1. SEM images of ZnO nanofibers calcined at 400 (a), 500 (b), 650 (c) and 800°C for 4h.

The research was supported by the European Union within European Regional Development Fund, through grant Innovative Economy (POIG.01.01.02-00-008/08), and by the Ministry of Science and Higher Education (Poland) through Grant No. N518 424036.

1. J.Y. Park, S.S. Kim., Growth of Nanograins in Electrospun ZnO Nanofibers, *J Am. Ceram. Soc.* 92 [8] 1691–1694 (2009). 2. V. Pachauri, A. Vlandas, K. Kern, K. Balasubramanian, Site-specific self-assembled liquid-gated ZnO nanowire transistors for sensing applications, *Small*, 6 [4], 589-594 (2010).

15:15

Poster

2

Reconstruction of the 3D electron momentum density distribution in Mg by the maximum entropy method

Marek Brancewicz¹, Eugeniusz Żukowski¹, Andrzej Andrejczuk¹, Maciej Pylak², Ludwik Dobrzyński^{1,2}

1. *University of Białystok, Faculty of Physics, ul. Lipowa 41, Białystok 15-424, Poland* **2.** *The Andrzej Soltan Institute for Nuclear Studies (IPJ), Otwock-Świerk 05-400, Poland*

e-mail: brancew@alpha.uwb.edu.pl

Three-dimensional electron momentum density (EMD) distribution (ρ^{3D}) for valence electrons in hexagonal Mg was reconstructed by the maximum entropy method (MEM) using four one-dimensional experimental projections of the ρ^{3D} , the so-called Compton profiles (CP's). The high-resolution (0.12 a.u.) CP's were measured with the use of synchrotron radiation at SPring-8 (station BL08W) [1]. Before being used in reconstructions, the experimental profiles were deconvoluted with experimental resolution function by the MEM method.

The two-step MEM reconstruction procedure was applied. First, deconvoluted one-dimensional EMD distribution (ρ^{1D}) was reconstructed in the isotropic approximation using averaged experimental Compton profile and the Schülke model of the EMD in the correlated electron gas [2] as a *prior* (initial information). The result of this reconstruction was then interpolated into 3D momentum space

and was used as a *prior* in ρ^{3D} reconstruction together with four deconvoluted experimental CP's.

The two-dimensional EMD distributions in the hexagonal plane (ρ^{2D}) were also calculated as a line integral of the ρ^{3D} along the Z (ΓA) axis. In order to observe the electron occupancy (in k space), Lock-Crisp-West (LCW) folding procedure [3] into the first Brillouin zone was then applied. The results (ρ^{2D-LCW}) were compared with the MEM reconstruction based on the five theoretical CP's (Korringa-Kohn-Rostoker method [4, 5]) and adequate reconstruction results using Cormack's method [6, 7] (Fig. 1). The both methods were compared with the calculations based on the free electron model.

The advantage of MEM in the EMD reconstruction with insufficient experimental information was affirmed despite of the low quality of the reconstructed ρ^{3D} . The reconstruction results, based on the experimental Mg profiles, showed that we are able to observe even small distortions of the Fermi surface in the regions of Brillouin zone boundaries. There are subtle but clear differences between the results obtained by the maximum entropy and the Cormack's methods in the observed electron occupancy.

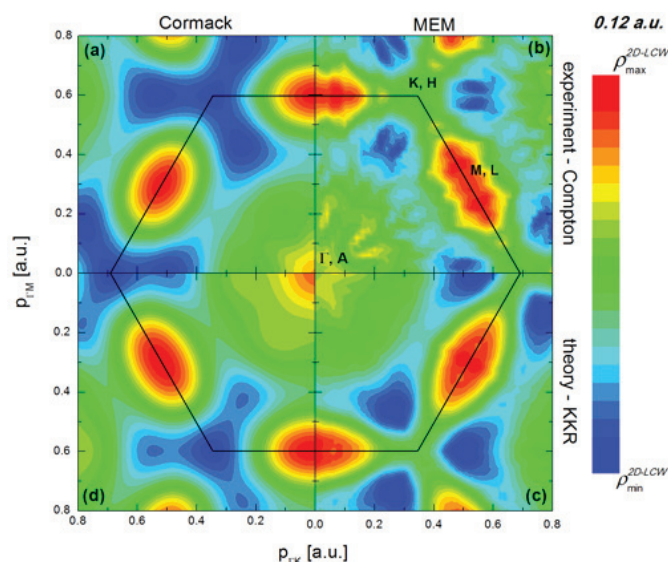


Figure 1 The ρ^{2D-LCW} densities reconstructed by the Cormack method (a, d) and MEM (b, c). (a, b) panels show the reconstruction results based on the experimental CP's and (c, d) panels show the results based on the theoretical (KKR) CP's. The locations of the special high-symmetry points projected to a MTK plane are marked on (b).

References

- [1] Y. Sakurai, M. Itou, *J. Phys. Chem. Solids* **65** (2004) 2061.
- [2] W. Schülke, G. Stutz, F. Wohler, A. Kaprolat, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 14381.
- [3] D.G. Lock, V.H.C. Crisp, N.R. West, *J. Phys. F: Met. Phys.* **3** (1972) 561.
- [4] J. Korringa, *Physica* **13** (1947) 392.
- [5] W. Kohn, N. Rostoker, *Phys. Rev.* **94** (1954) 1111.
- [6] A.M. Cormack, *J. Appl. Phys.* **34** (1963) 2722, **35** (1964) 2908.
- [7] G. Kontrym-Sznajd, M. Samsel-Czekala, M. Pylak, L. Dobrzyński, M. Brancewicz, A. Andrejczuk, E. Żukowski, S. Kaprzyk, *Phys. Stat. Sol. B* **248**, 3 (2011) 719.

15:15

Poster

3

Hydrothermal synthesis of layered double hydroxide-terephthalate intercalation compounds

Jolanta Darul

Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry, Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

e-mail: jola@amu.edu.pl

Inorganic/organic composite materials composed of Zn-Al layered double hydroxide (Zn-Al LDHs) intercalated with the terephthalate dianion [$C_6H_4(COO^-)_2$ or TA] have been successfully prepared by hydrothermal method and characterized by X-ray diffraction, FTIR spectroscopy and thermal analysis. The aim of the present work is to obtain insight into the nature of LDH materials when the experimental conditions during hydrothermal or thermal treatment are changed. Although the crystals of synthetic hydrotalcites are usually very small, it has been shown to be possible to enlarge the crystal size (and so sharpen the diffraction pattern) by synthesis upon hydrothermal treatment. The solids obtained by this reaction show pure LDH structure with good crystallinity and homogeneity in composition and an extended interlayer region, because of the intercalation of the organic molecules. The structure, orientation and thickness of LDH composites were investigated. At room temperature, X-ray diffraction indicated that the terephthalate anion adopts a vertical orientation (interlayer spacing $d_{003} = 14.2 \text{ \AA}$) between the hydroxide layers. As the time to which the samples have been submitted to a hydrothermal treatment is prolonged, a change in the Zn/Al ratio is observed, together with a more ordered structure of the species existing in the interlayer space. This procedure is a simple way to obtain a high-charge 'hydrotalcite-like' compounds (HTLCs) free of inorganic C. This result adds new flexibility to our ability to synthesize HTLCs and has important implications for synthesis of other layered compounds with oxide or hydroxide structures.

Acknowledgements: This research is partially supported by the Polish Ministry of Science and Higher Education, Grant No. NN204330537.

15:15

Poster

4

Monocrystalline character of ZnMgTe shell in the core-shell ZnTe/ZnMgTe nanowires

Elzbieta Dynowska¹, Jaroslaw Domagala¹, Przemyslaw Romanowski¹, Elzbieta Janik¹, Piotr Wojnar¹, Wolfgang Caliebe²

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB (HASYLAB), Notkestrasse 85, Hamburg D-22603, Germany

e-mail: dynow@ifpan.edu.pl

In the case of narrow nanowires (NWs) the surface-to-volume ratio is extremely large and surface states significantly reduce the carrier lifetime and degrade the optoelectronic device performance. Therefore, a surface passivation is of a great importance, especially for ZnTe NWs which oxidize easily. Such passivation can be achieved by forming a shell of a large band gap material around the NW so

that the surface states are moved away from the charge carriers confined in the core.

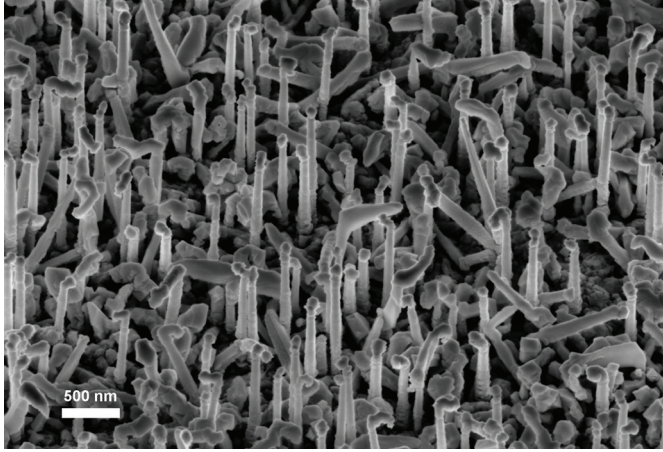


Figure 1. The SEM image of a side-view of the 090110A sample.

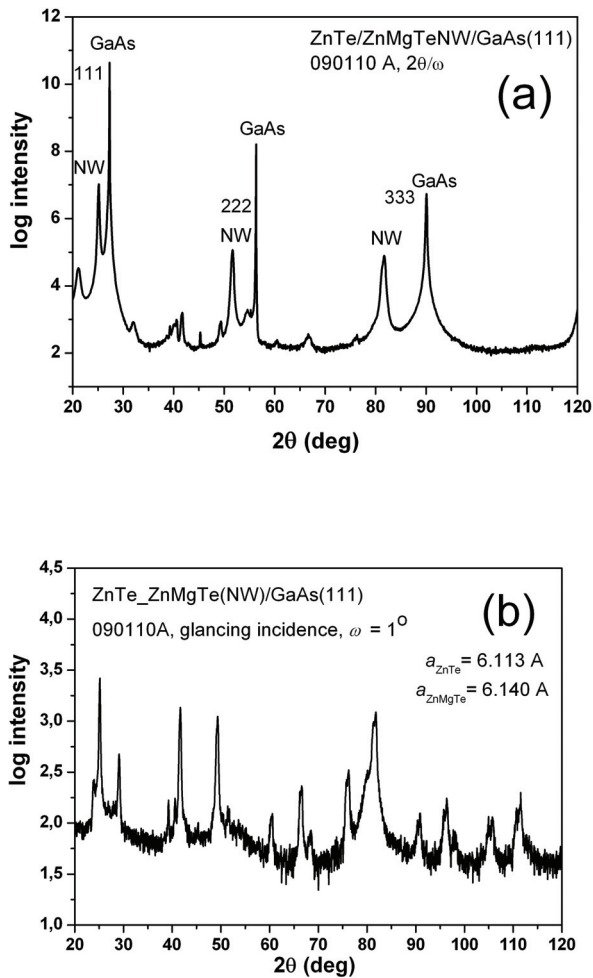


Figure 2. The diffraction patterns of the 090110A sample: (a) symmetrical $2\theta/\omega$ scan, (b) 2θ scan in glancing incidence geometry.

Sample	T_{axial} ZnTe core (relative)	T_{radial} $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ shell (relative)	Time of the shell growth	Post growth annealing	
				Temperature	Time
090110A	470 °C	380 °C	10 min	450 °C	30 min
090110B	470 °C	380 °C	15 min	450 °C	30 min
092910A	470 °C	380 °C	10 min	450 °C	30 min
092910B	470 °C	380 °C	10 min	none	none

Table 1. The growth and annealing parameters of the core-shell ZnTe/ $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ nanowires.

In this report we present the results of structural characterization of the core-shell ZnTe/ $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ NWs grown by MBE technique on the GaAs(111) substrate. The $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ NWs were grown at the temperature of about 470 °C according to the procedure described in [1]. The $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ shells were produced immediately after the growth of the $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ cores. In order to produce such shells the substrate temperature was reduced to the value which stops the axial growth of NWs and forces the radial growth of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ shell. The post growth annealing has been applied for some samples. The technological parameters of the investigated samples are listed in the Table 1, and the electron scanning microscopy (SEM) image of a side-view of the 090110A sample is shown in Fig. 1

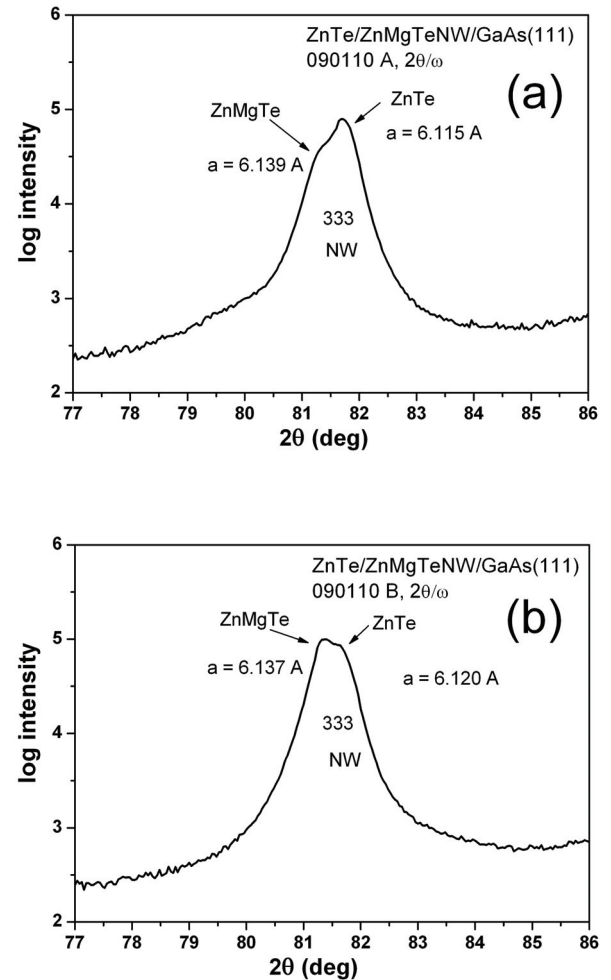


Figure 3. The part of the 2θ - ω diffraction pattern in the vicinity of the 333 NW peaks of the samples 090110A and 090110B with different time of the shell growth: (a) 10 minutes; (b) 15 minutes.

The X-ray measurements were performed using synchrotron radi-

ation at the W1 beamline at DESY-HASYLAB. The monochromatic X-ray beam of wavelength $\lambda = 1.54056 \text{ \AA}$ was used. Two modes of measurement were applied: symmetrical 2θ - ω scan and coplanar 2θ scan in the glancing incidence geometry [2].

The diffraction patterns measured for the sample 090110A in the symmetrical geometry (2θ - ω scan) and in the glancing incidence mode (2θ scan) are shown in Figure 2a,b. They are typical for all studied samples. It was confirmed that the crystallographic orientation of the substrate forces the orientation of NWs – three orders of reflections from (111) lattice planes from GaAs substrate and from NWs are visible in the pattern presented in Figure 2a. The measurement in the glancing incidence geometry (Fig. 2b) shows the relatively thin polycrystalline layer grown on the substrate between NWs. A zoom of the symmetrical pattern in the vicinity of 333 NW peak allows to notice its splitting (see Figs 3 and 4). This splitting indicates the monocrystalline character of the $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ shell with the same crystallographic orientation as that of the ZnTe core.

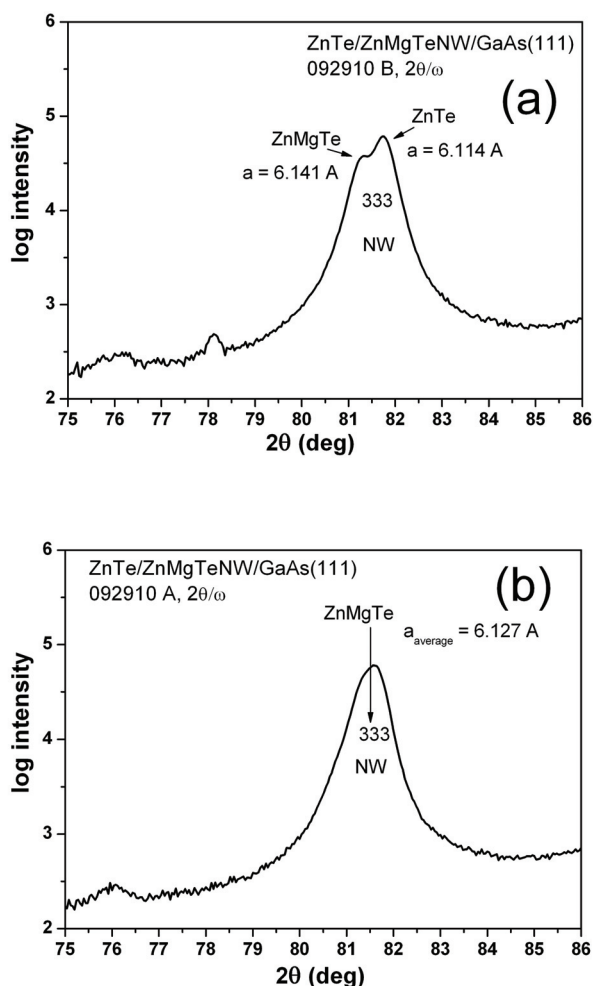


Figure 4. The part of the 2θ - ω diffraction pattern in the vicinity of the 333 NW peaks: (a) not annealed 092910B sample; (b) sample 092910A annealed at 450°C .

The second pair of the samples (092910A and 092910B) shows an influence of the post-growth annealing on the NWs structure. In the not annealed sample, 092910B, the splitting of the 333 NW peak is clearly visible (Fig. 4a), while in the annealed sample, 092910A,

only small asymmetry on the left side of the peak can be noticed (Fig. 4b), which may be caused by the diffusion of Mg to the core during annealing procedure.

From the lattice parameters calculated for $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ shell components of the NWs their chemical composition x can be estimated as follows: $x \approx 0.11$ for the samples 090110A and 090110B and $x \approx 0.12$ for sample 092910B. In the case of 092910A sample only average value of x can be estimated: $x_{\text{average}} = 0.075$.

As it is visible from the Figures 3 and 4, the lattice parameters of the ZnTe cores are larger than that of the uncovered ZnTe NWs [3] – the most probable reason of such behaviour is the tensile strain of ZnTe core caused by $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Te}$ shell.

Acknowledgements: This work was partially supported by the European Community-Research Infrastructure Action under the FP6 "Structuring the European Research Area" Programme (through the Integrated Infrastructure Initiative "Integrating Activity on Synchrotron and Free Electron Laser Science", Contract RII3-CT-2004-506008) and the European Union within European Regional Development Fund, through grant Innovate Economy (POIG.01.01.02-00-008/08).

References

- [1] E. Janik, P. Dłużewski, S. Kret, A. Presz, H. Kirmse, W. Neumann, W. Zaleszczyk, L.T. Baczewski, A. Petroutchik, E. Dynowska, J. Sadowski, W. Caliebe, G. Karczewski, T. Wojtowicz, *Nanotechnology* 18 (2007) 475606
- [2] E. Dynowska, W. Szuszkiewicz, J.Z. Domagała, E. Janik, M. Wiater, G. Karczewski, T. Wojtowicz, W. Caliebe, *HASYLAB Annual Reports* (2006) 756
- [3] E. Dynowska, W. Szuszkiewicz, J.Z. Domagała, E. Janik, A. Presz, T. Wojtowicz, G. Karczewski, W. Caliebe, *Radiation Physics and Chemistry* 78 (2009) 120

15:15

Poster

5

High-pressure diffraction study of structural and elastic properties of zircon-type and scheelite-type RVO_4 ($R = \text{Nd, Eu}$)

Olga Ermakova^{1,2}, Wojciech Paszkowicz¹, Paweł Piszora³, Roman Minikayev^{1,4}, Ewa Werner-Malento¹, Stanisław Gierlotka⁵, Marek Berkowski¹, Janusz D. Fidelus⁵, Yngve Cerenius⁶, Stefan Carlson⁶

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland 2. Russian Academy of Sciences, Ural Division, Institute of Solid State Chemistry (ISSC), Pervomaiyskay, 91, Ekaterinburg 620219, Russian Federation 3. Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry, Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland 4. Sincrotrone Trieste, Strada Statale 14, km 163.5, in AREA Science Park, Trieste 34012, Italy 5. Polish Academy of Sciences, Institute of High Pressure Physics (UNIPRESS), Sokolowska 29/37, Warszawa 01-142, Poland 6. Lund University, MAX-lab, Lund SE-221 00, Sweden

e-mail: ermak@ifpan.edu.pl

Rare-earth orthovanadates (RVO_4 , with $R = \text{Sc, Y, La-Lu}$) crystallize, typically, in $I4_1/amd$ space group (zircon type structure). They

transform to the scheelite-type structure ($I4_1/a$ space group) under high-pressure conditions of several GPa. As the transition is irreversible, it is possible to study the properties of scheelite polymorph at ambient pressure. The first detailed information on transition of this kind at hydrostatic conditions was reported for YVO_4 [1, 2]. Physical properties of zircon-type rare-earth orthovanadates are better recognized, and various applications have been proposed for them, in particular they can be applied as catalysts. The orthovanadates with the scheelite structure attract attention because some representatives such as $EuVO_4$ show strong luminescence [3] creating an opportunity for application in optoelectronic devices. The above-mentioned features resulted in an increasing interest in structural phase transitions, their mechanisms and in equations of state for both RVO_4 polymorphs.

The aim of the present investigation was the *in-situ* observation of the zircon-scheelite phase transition under pressure and determination of elastic properties for two members of the RVO_4 family, $NdVO_4$ and $EuVO_4$, for both zircon and scheelite type polymorphs. The samples of zircon structures were obtained by solid state reaction between R_2O_3 ($R = Nd, Eu$) and V_2O_5 at temperatures of 1100°C for $NdVO_4$ and 950°C for $EuVO_4$. The samples transformed to scheelite-type structure after compression of zircon-type phase at elevated temperature.

In-situ high-pressure X-ray diffraction experiments were performed in the range up to 15 GPa at I711 beamline MAX II (Lund, Sweden) using a diamond-anvil cell. The samples studied were placed in a hole drilled in a pre-indented stainless-steel gasket which was subsequently clamped between two diamond anvils having 0.3 mm diameter culets. A water-ethanol-methanol mixture was used as pressure-transmitting medium providing hydrostatic compression conditions up to about 10 GPa. The applied pressure was measured by laser-excited ruby luminescence. Data acquisition was carried out using MAR165 area detector. Using the aforementioned experimental approach, the zircon-type $NdVO_4$ and scheelite-type $EuVO_4$ were studied. The acquired experimental data were analyzed using Rietveld method providing the information on structure of the material. For $NdVO_4$, the zircon-scheelite phase transition was observed in the pressure range from 4.35 to 5.75 GPa. Bulk modulus values were calculated for both materials from the volume-pressure relationship.

References

- [1] A. Jayaraman, G.A. Kourouklis, G.P. Espinosa, A.S. Cooper, L.G. Van Uitert, "A high-pressure Raman study of yttrium vanadate (YVO_4) and the pressure-induced transition from the zircon-type to the scheelite-type structure," *J. Phys. Chem. Solids* **48**, 8 (1987) 755-759.
- [2] X. Wang, I. Loa, K. Syassen, M. Hanfland, B. Ferrand, "Structural properties of the zircon- and scheelite-type phases of YVO_4 at high pressure," *Phys. Rev. B* **70** (2004) 064109.
- [3] G. Chen, R.G. Haire, J.R. Peterson, M.M. Abraham, "A luminescence study of $EuVO_4$ at high pressure," *J. Phys. Chem. Solids* **55**, 4 (1994) 313-316.

15:15

Poster

6

Elastic properties of dysprosium orthovanadate: An in-situ powder-diffraction study

Olga Ermakova^{1,2}, Roman Minikayev^{1,3}, Christian Lathe^{4,5}, Hanna Dabkowska⁶, Wojciech Paszkowicz¹

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Russian Academy of Sciences, Ural Division, Institute of Solid State Chemistry (ISSC), Pervomayskay, 91, Ekaterinburg 620219, Russian Federation **3.** Sincrotrone Trieste, Strada Statale 14, km 163.5, in AREA Science Park, Trieste 34012, Italy **4.** GeoForschungsZentrum Potsdam, (GFZ), Telegrafenberg A17, Potsdam D-14473, Germany **5.** HASYLAB at DESY, Notkestr., Hamburg 22607, Germany **6.** Department of Physics, McMaster University, Hamilton L8S 4M1, Canada

e-mail: ermak@ifpan.edu.pl

Rare-earth orthovanadates (RVO_4) are well known as materials with possible applications mostly as laser materials [1-6]. RVO_4 ($R = Y, Ce-Lu$) crystallize in zircon-type structure, $I4_1/amd$ space group. An irreversible pressure-induced phase transition from zircon to scheelite-type structure occurs for materials of this type in the pressure range of 5-10 GPa [7,8].

During the present investigation, structural and elastic properties of dysprosium orthovanadate were studied using the powder diffraction method. The studied $DyVO_4$ single crystal was grown by the slow cooling from molten flux. The sample for diffraction analysis was prepared by grinding in an agate mortar. Powder diffraction data at ambient pressure were obtained using a laboratory diffractometer (X'PERT MRD, Philips, with Cu X-ray tube). The lattice parameters calculated using Rietveld method are $a = 7.147(2)$ Å, $c = 6.308(2)$ Å, $V = 322.16(6)$ Å³.

In-situ powder diffraction experiment under pressure was performed at the F2.1 beamline Hasylab/DESY (Hamburg, Germany) using the MAX80 X-ray diffraction press. In this experiment applied pressure was in range from ambient up to 8.45 GPa. Energy-dispersive powder diffraction patterns were obtained with steps about 0.7 GPa. Within the studied range, the phase transition from zircon to scheelite structure was not observed. Cell parameters were calculated by Le Bail method. Above 6 GPa, a diffraction-peak broadening, apparently due to the presence of strain, was observed. In order to minimize the influence of deviatoric stresses on the derived elastic properties, we limited the calculations to the range from ambient pressure to 6 GPa. The lattice parameters vary, in this range, from $a = 7.151(1)$ Å, $c = 6.301(1)$ Å, $V = 322.17(16)$ Å³ to $a = 7.0314(2)$ Å, $c = 6.233(2)$ Å, $V = 308.16(20)$ Å³. The bulk modulus $B_0 = 121(2)$ GPa was calculated by fitting the smooth experimental $V(p)$ dependence using the second order Birch-Murnaghan equation of state. This value is by about 25% lower than the only published one (160 GPa) evaluated on the basis of Raman-spectroscopy data [9], but remains close to the value for a related compound, YVO_4 , determined at hydrostatic conditions by Wang et al [10].

References

1. R.A. Fields, M. Birnbaum, C.L. Fincher, "Highly efficient

- Nd:YVO₄ diode-laser end-pumped laser," *Appl. Phys. Lett.* **51** (1987) 1885-1886.
- A.I. Zagumennyi, V.G. Ostroumov, I.A. Shcherbakov, T. Jensen, J.P. Meyen, G. Huber, "The Nd:GdVO₄ crystal: A new material for diode-pumped lasers," *Sov. J. Quantum Electron.* **22** (12) (1992) 1071-1072.
 - A.A. Kaminskii, K. Ueda, H.J. Eichler, Y. Kuwano, H. Kouta, S.N. Bagaev, T.H. Chyba, J.C. Barnes, G.M.A. Gad, T. Murai, J. Lu, "Tetragonal vanadates YVO₄ and GdVO₄ – new efficient $\chi(3)$ -materials for Raman lasers," *Optics Commun.* **194**, 1-3 (2001) 201-206.
 - E.V. Tsipis, M.V. Patrakeev, V.V. Kharton, N.P. Vyshatko, J. R. Frade, "Ionic and p-type electronic transport in zircon-type Ce_{1-x}AxVO₄ (A = Ca, Sr)," *J. Mater. Chem.* **12** (2002) 3738-3745.
 - M. Yu, J. Lin, S.B. Wang, "Effects of x and R³⁺ on the luminescent properties of Eu³⁺ in nanocrystalline YV_{1-x}P_xO₄:Eu³⁺ and RVO₄:Eu³⁺ thin-film phosphors," *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Proc.* **80** (2005) 353-360.
 - F. Chen, X. Wang, S. Li, G. Fu, K. Wang, Q. Lu, D. Shen, R. Nie, H. Ma, "Low-loss optical planar waveguides in YVO₄ produced by silicon ion implantation at low doses," *J. Appl. Phys.* **94** (2003) 4708-4710.
 - O. Fukunaga, S. Yamaoka, "Phase transformations in ABO₄ type compounds under high pressure," *Phys. Chem. Miner.* **5** (1979) 167-177.
 - O. Muller, R. Roy, "Phase transitions among the ABX₄ compounds," *Z. Kristallogr. Mineral.* **138** (1973) 237-253.
 - G. Chen, R.G. Haire, J.R. Peterson, "Compressibilities of TbVO₄ and DyVO₄ calculated from spectroscopic data," *Appl. Spectrosc.* **46** (1992) 1495-1497.
 - X. Wang, I. Loa, K. Syassen, M. Hanfland, B. Ferrand, "Structural properties of the zircon- and scheelite-type phases of YVO₄ at high pressure," *Phys. Rev. B* **70** (2004) 064109.

15:15

Poster

7

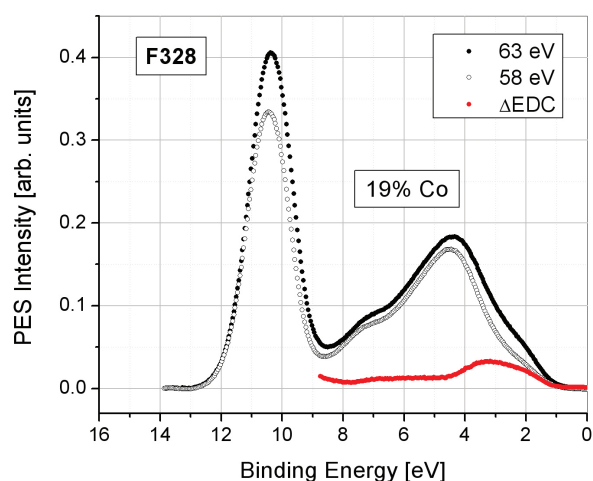
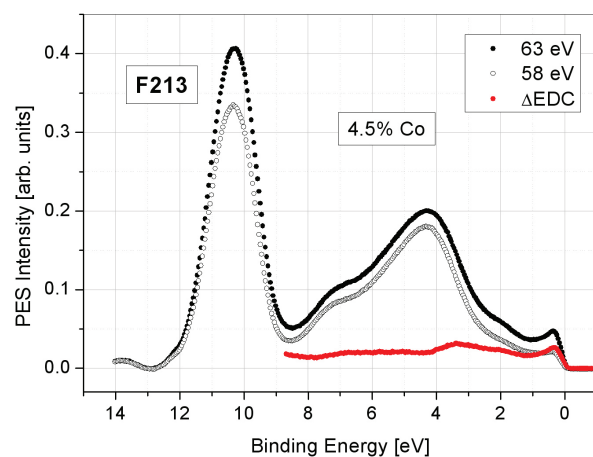
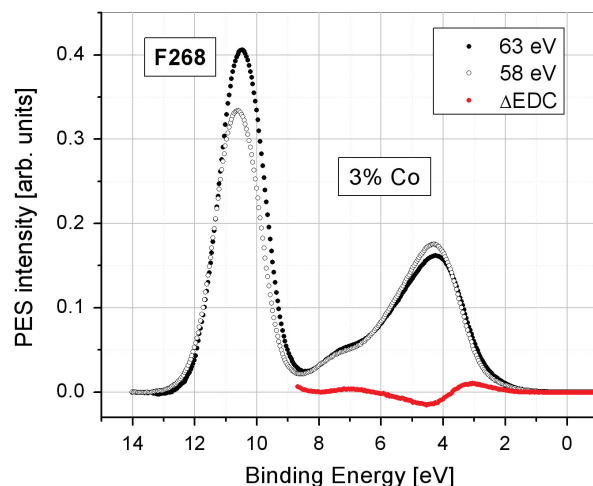
Rezonansowe badania fotoemisyjne ferromagnetycznych warstw ZnCoO

Elżbieta Guzewicz¹, Małgorzata I. Łukasiewicz¹, Łukasz Wachnicki¹, Krzysztof Kopalko¹, Marek Godlewski^{1,2}

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Cardinal Stefan Wyszyński University, College of Science, Warszawa, Poland

e-mail: guzel@ifpan.edu.pl

Półprzewodniki półmagnetyczne są ostatnio intensywnie badane w związku z nadzieją na zastosowania w spintronice. Wśród tych materiałów duże zainteresowanie budzi tlenek cynku z dodatkiem kobaltu. Dzieje się tak dlatego, że jony kobaltu Co²⁺ oraz cynku Zn²⁺ mają prawie identyczne promienie jonowe, dlatego możliwe jest wprowadzanie do tlenku cynku stosunkowo dużych ilości kobaltu. Ferromagnetyzm w temperaturze pokojowej dla warstw ZnCoO był opisywany już 10 lat temu [1], wciąż jednak trwają spory jakie jest jego pochodzenie. Część autorów wskazuje, że przyczyną ferromagnetyzmu w ZnCoO są defekty sieci [2], część wiąże go z wytrąceniami obcych faz, głównie tlenków kobaltu [3]. Część prac,



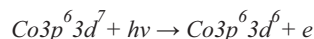
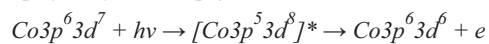
Rys. 1. Widma fotoemisyjne warstw ZnCoO. Widma mierzone były w maksimum ($h\nu = 63$ eV, pełne czarne kółka) oraz w minimum rezonansu ($h\nu = 58$ eV, puste czarne kółka). Krzywe różnicowe $\Delta EDC = EDC(63 \text{ eV}) - EDC(58 \text{ eV})$ pokazują wkład stanów Co3d do pasma walencyjnego.

w tym także nasze wcześniejsze badania [4], wskazuje, że przyczyną jest akumulacja metalicznego kobaltu w obszarze

międzypowierzchni oraz wytrącenia metaliczne w warstwach.

Istnieje bardzo niewiele badań fotoemisji rezonansowej dotyczących układów ZnCoO. Brak też porównania wyników rozkładu stanów $Co3d$ dla próbek ferro- i paramagnetycznych [5-6]. W naszej poprzedniej pracy [7] pokazywaliśmy wyniki badań paramagnetycznych warstw ZnCoO otrzymanych w niskiej temperaturze ($160^{\circ}C$) metodą osadzania warstw atomowych (ang. Atomic Layer Deposition, ALD). Badania prowadzone metodą rezonansowej spektroskopii fotoemisyjnej (ang. Resonant Photoemission Spectroscopy, RESPES) pokazały, że wkład powłoki $Co3d$ do pasma walencyjnego warstw ZnCoO jest różny dla próbek paramagnetycznych różniących się zawartością kobaltu. Dla badanych próbek ZnCoO największą intensywność fotoemisji z powłoki $Co3d$ zaobserwowano dla warstwy zawierającej 3.5% Co oraz najwyższą zawartość wodoru. W tym przypadku nie zaobserwowano też struktury satelitarnej znajdującej się ok. 7 eV poniżej poziomu Fermiego, co oznacza, że stany $Co3d$ są silnie związane ze stanami elektronowymi ligandów.

Prezentowane w tej pracy wyniki RESPES otrzymane zostały dla serii ferromagnetycznych warstw ZnCoO otrzymanych metodą ALD w temperaturach $200^{\circ}C$ - $300^{\circ}C$. Zawartość kobaltu w mierzonych warstwach wynosiła pomiędzy 2% a 19%. Badania fotoemisyjne zostały przeprowadzone w laboratorium synchrotronowym MAXlab (Szwecja) na linii pomiarowej I4. Fotoemisyjne krzywe rozkładu energetycznego (ang. Energy Distribution Curves, EDCs) mierzono dla energii fotonów bliskich rezonansowego przejścia $Co3p \rightarrow Co3d$. Dla tego obszaru energii fotonów (58 eV - 65 eV) obserwujemy zwiększoną intensywność fotoemisji z powłoki $Co3d$, co związane jest z interferencją pomiędzy dwoma ścieżkami fotoemisijnymi opisywanymi następująco:



Energję rezonansową przejścia określono jako 63 eV, natomiast antyrezonansową jako 58 eV [7]. Różnica pomiędzy widmami fotoemisijnymi zmierzonymi dla energii rezonansowej oraz antyrezonansowej ($\Delta EDC = EDC(63 \text{ eV}) - EDC(58 \text{ eV})$) obrazuje wkład elektronów $Co3d$ do struktury elektronowej pasma walencyjnego. Badania pokazały, że obliczone wkłady ΔEDC dla poszczególnych warstw ZnCoO różnią się pomiędzy sobą. Na podstawie analizy krzywych ΔEDC warstwy ZnCoO można podzielić na trzy grupy: i) warstwy, w których przy poziomie Fermiego wyraźnie widać wkład metalicznego kobaltu (rys. 1 a), ii) warstwy, w których następuje zmiana gęstości stanów macierzystego związku ZnO (krzywa antyrezonansowa 4.5 eV poniżej E_F jest wyższa od krzywej rezonansowej), rys. 1 b, iii) warstwy ZnCoO, dla których wkład elektronów $Co3d$ obserwowany jest pomiędzy 2 eV a 4 eV poniżej poziomu Fermiego (rys. 1c).

W przypadku żadnej z ferromagnetycznych warstw ZnCoO nie zaobserwowano struktury satelitarnej przy energii wiązania 7 eV. Ta ostatnia struktura obserwowana jest powszechnie w badaniach fotoemisyjnych paramagnetycznych warstw ZnCoO [5-6].

Podziękowania

Autorzy dziękują za finansowanie badań przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego, poprzez grant Innovative Economy (POIG.01.01.02-00-008/08), Research Infrastructure Action w programie ramowym FP6 « Structuring the

European Research Area » (Integrated Infrastructure Initiative “Integrating Activity on Synchrotron and Free Electron Laser Science”).

1. Ueda, K., Tabata, H., Kawai, T., **Appl. Phys. Lett.** **79**, 988 (2001)
2. Coey, J.M.D., Wongsaprom, K., Alaria J., Venkatesan, M., **J. Phys. D Appl. Phys.** **41**, 134012 (2008)
3. Behan, A.J., Mokhtari, A., Blythe, H.J., Score, D., Xu, X-H., Neal, J.R., Fox, A.M., Gehring, G.A., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 047206 (2008)
4. M. Godlewski, E. Guziejewicz, M.I. Łukasiewicz, A.I. Kowalik, M. Sawicki, B.S. Witkowski, R. Jakiela, W. Lisowski, J.W. Sobczak, and M. Krawczyk, **phys. stat. sol.(b) (in print)**, DOI 10.1002/pssb.201001142)
5. Wi, S.C., Kang, J.-S., Kim, J.H., Cho, S.-B., Kim, B.J., Yoon, S., Suh, B.J., Han, S.W., Kim, K.H., Kim, K.J., Kim, B.S., Song, H.J., Shin H.J., Shim, J.H., Min, B.I., **Appl. Phys. Lett.** **84**, 4233 (2004)
6. Kobayashi, M., Ishida, Y., Hwang, J.I., Mizokawa, T., Fujiwara, A., Mamiya, K., Okamoto, J., Takeda, Y., Okane, T., Saitoh, Y., Muramatsu, Y., Tanaka, A., Saeki, H., Tabata, H., Kawai, T., **Phys. Rev. B** **72**, 201201(R) (2005)
7. E. Guziejewicz, M.I. Łukasiewicz, L. Wachnicki, K. Kopalko, A. Kovacs, R.E. Dunin-Borkowski, B.S. Witkowski, B.J. Kowalski, J. Sadowski, M. Sawicki, R. Jakiela, M. Godlewski, **Rad. Phys. Chem.** **2011** (doi:10.1016/j.radphyschem.2011.05.004)

15:15

Poster

8

Damage of gallium arsenide created after irradiation by ultra-short VUV laser pulse

Dorota Klinger¹, Ryszard Sobierajski¹, Jerzy Pelka¹, Elżbieta Łusakowska¹, Danuta Zymierska¹, Wojciech Wierzchowski², Krzysztof Wieteska³, Tomasz Balcer², Jaroslav Chalupsky⁴, Wiera Hajkova⁴, Tomas Burian⁴, Anthony J. Gleeson⁷, Libor Juha⁴, Karl Tiedtke⁵, Sven Toleikis⁵, Hubertus Wabnitz⁵, Jerome Gaudin⁶

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Institute of Electronic Materials Technology (ITME), Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland **3.** Institute of Atomic Energy, Otwock-Świerk 05-400, Poland **4.** Czech Academy of Sciences, Institute of Physics, Na Slovance 2, Prague 182-21, Czech Republic **5.** Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB (HASYLAB), Notkestrasse 85, Hamburg D-22603, Germany **6.** European XFEL Project Team (DESY), Notkestraße 85, Hamburg 22607, Germany **7.** Daresbury Laboratory (DL), Daresbury, Warrington WA4 4AD, United Kingdom

e-mail: Dorota.Klinger@ifpan.edu.pl

Various aspects of the ablation mechanism by laser pulse with different duration times have been discussed in several review papers. Shortening the pulse duration time to femtoseconds causes obtaining the phenomena occurring in the material in ultra-short time Chemical reactions, phase transitions and surface processes occur in a very rapid timescale comparable to the natural oscillation periods of atoms [1,2].

Ultra-short pulse ablation was studied for a wide variety of materials, including semiconductors i.e. GaAs. Up to now mainly femtosecond optical lasers generating radiation from near IR range have been used for material stimulation [3-5].

Recently the VUV and XUV laser beam generated by the new type of source are becoming interesting for materials modifications. Preliminary experimental results confirmed the assumption that the absorption depth for most materials can be much bigger, than when using femtosecond optical pulses [6-8]. Damage processes induced by laser pulses lead to the formation of specific morphological structures of sizes in micrometer and nanometer scales [9,10].

There is still lack of knowledge about the basic physical mechanisms of nano- and microstructures formation, including the impact of the wavelength of generated radiation and of laser fluence. Detailed studies of surface structures morphology and structural changes would provide a clear physical picture of the ablation processes in materials irradiated by femtosecond pulses from VUV range.

In the current work we present the laser ablation investigations of GaAs. The experiments were conducted with the laser femtosecond pulse at the wavelength 32 nm. Effects of the ablation process on the structure and the composition of the samples in the micron scale is studied using a number of analytical techniques.

[1]. Sundaram S.K., Mazur E., Inducing and probing non-thermal transitions in semiconductors using femtosecond laser pulses., nature materials 1(2002) 217-224.

[2] Jiang L., Tsai H.L., Energy transport and material removal in wide bandgap materials by a femtosecond laser pulse, Int. J. Heat and Mass Transfer 48(2005) 487-499.

[3] Borowiec A., Mackenzie M., Weatherly G.C., Haugen H.K., Femtosecond laser pulse ablation of GaAs and InP: studies utilizing scanning and transmission electron microscopy, Appl. Phys. A 77 (2003) 411-417.

[4] Amit Pratap Singh, Avinashi Kapoor, K.N.Tripathi, Ripples and grain formation in GaAs surfaces exposed to ultrashort laser pulses, Optics&Laser Technol. 34 (2002) 533-540.

[5] Cavallieri A. Sokolowski-Tinten K., Bialkowski J., von der Linde D., Femtosecond laser ablation of gallium arsenide investigated with time-of-flight mass spectroscopy, Appl. Phys. Lett. 72 (1998) 2385-2387.

[6] Hau-Riege, S.P., London, R.A., Bionta, et al., Damage threshold of inorganic solids under free-electron-laser irradiation at 32.5 nm wavelength. Appl. Phys. Lett. 90 (2007) 173128.

[7] Krzywinski, J., Sobierajski, R., Jurek, M. et al, Conductors, semiconductors, and insulators irradiated with short-wavelength free-electron laser. J. Appl. Phys. 101 (2007) 043107.

[8] Stojanovic, N., von der Linde, D., Sokolowski-Tinten, K., Zastrau, U., Perner, F., Förster, E., Sobierajski, R., Nietubyc, R., Jurek, M., Klinger, D., Pelka, J., Krzywinski, J., Juha, L., Cihelka, J., Velyhan, A., Koptyaev, S., Hajkova, V., Chalupsky, J., Kuba, J., Tschentscher, T., Toleikis, S., Düsterer, S., Redlin, H., Ablation of solids using a femtosecond extreme ultraviolet free electron laser. Appl. Phys. Lett. 89 (2006) 241909.

[9] Pelka J., Sobierajski R., Klinger D. et al., Damage In solids irra-

diated by a single shot of XUV free-electron laser: Irreversible changes investigated using X-ray microdiffraction, atomic force microscopy and Nomarski optical microscopy, Rad. Phys Chem. 78 (2009) S46-S52.

[10] R. Sobierajski, D. Klinger, M. Jurek, J. B. Pelka, L. Juha, J. Chalupský, J. Cihelka, V. Hajkova, L. Vysin, U. Jastrow, N. Stojanovic, S. Toleikis, H. Wabnitz, J. Krzywinski, S. Hau-Reige, R. London, "Interaction of intense ultrashort XUV pulses with silicon", Proc. SPIE, Vol. 7361 (2009) 736107.

15:15

Poster

9

Electronic band structure and magnetic properties of

$\text{La}_{2/3}\text{Pb}_{1/3}\text{Mn}_{2/3}\text{Fe}_{1/3}\text{O}_3$

Marcin Kowalik^{1,2}, Waldemar Tokarz¹, Ryszard Zalecki¹, Andrzej Kołodziejczyk¹

1. AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science (AGH), Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland 2. Rzeszów University of Technology, Rzeszów, Poland

e-mail: mkowalik@prz.edu.pl

We present theoretical study of some electric and magnetic properties in manganese perovskite $\text{La}_{2/3}\text{Pb}_{1/3}\text{Mn}_{2/3}\text{Fe}_{1/3}\text{O}_3$. The calculation was carried out based on first-principles density functional theory (DFT) with general gradient approximation GGA+U using Wien2K package. The P-3c1 crystal structure was taken from the detailed X-ray diffraction data for the perovskite [1]. For Mn and Fe *d* electrons exact exchange energy was utilized. Two different configurations of initial magnetic moment orientation (parallel [*Mn UP*, *Fe UP*] and antiparallel [*Mn UP*, *Fe DOWN*]) between Mn and Fe atoms was considered in self consistent calculation. Density of state (DOS) determined by modified tetrahedron method displays band gap for both spin initialization (fig.1 and 2). On the basis of previous work [2] we expect that this compound should show insulating ground state. In order to get consistent results we have started calculations in paramagnetic non-polarized spin magnetic ground state of the compound.

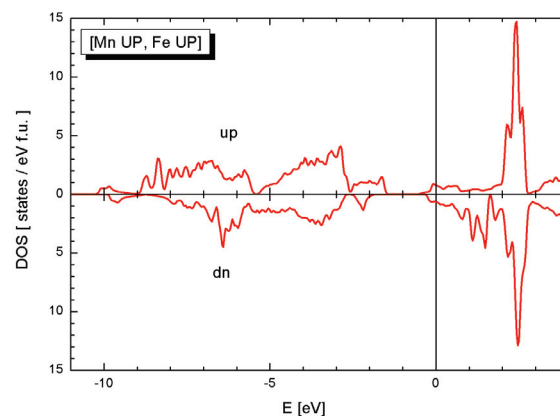


Fig. 1. Total DOS for spin up (up) and down (dn) for parallel magnetic moment orientation.

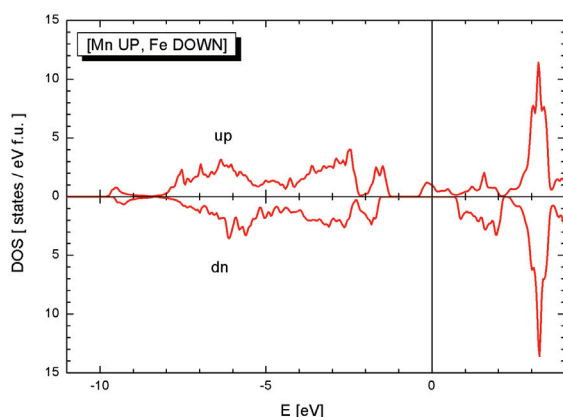


Fig. 2. Total DOS for spin up (up) and down (dn) for antiparallel magnetic moment orientation.

References:

- [1] Gritzner, G., Koppe, M., Kellner, K., Przewoznik, J., Chmista, J., Kołodziejczyk, A., Krop, K., 2005. Preparation and properties of $\text{La}_{0.67}\text{Pb}_{0.33}(\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{O}_3$ compounds. *Appl. Phys. A* 81, 1491-1495
- [2] Przewoznik, J., Kowalik, M., Kołodziejczyk, A., Gritzner, G., Kapusta, C., 2010. Magnetic and magnetotransport properties of the $(\text{La}_{0.67}\text{Pb}_{0.33})(\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 0.1$) compounds. *J. All. Comp.* 497, 17-23
- [3] Kowalik, M., Zalecki, R., Kołodziejczyk, A., 2010. Electronic States of Colossal Magnetoresistive Manganites $\text{La}_{0.67}\text{Pb}_{0.33}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ from Photoemission Spectroscopy. *Acta Phys. Polon. A* 117, 257-260

15:15

Poster

10

Optimization of technology for contact metallization in electronic devices - XRD and EXAFS studies

Krystyna Lawniczak-Jablonska¹, Marcin T. Klepka¹, Anna Wolska¹, Elzbieta Dynowska¹, Michał A. Borysiewicz²

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Institute of Electron Technology (ITE), al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

e-mail: jablo@ifpan.edu.pl

Semiconductor III-N based High Electron Mobility Transistors (HEMT) used for high frequency and high power applications require thermally and chemically stable metallization. The high current-induced heat dissipation in the metallization adds to the environmental heat of such devices, leading to fast degradation of the conventional Ti/Al ohmic and Ni/Au Schottky contacts. The unique combination of metallic electro-thermal conductivity with the ceramic resistance to oxidation and thermal stability makes the ternary compounds belonging to MAX phases in particular the Ti_3SiC_2 phase, promising as the materials potentially applicable for metallization in such electronic devices. Most of the papers discussing the fabrication of the MAX compounds are related to the synthesis of bulk compounds from powders. Only recently there have been reports on the growth of thin film MAX phases using physical vapour

deposition, in particular by means of high-temperature magnetron sputtering.

The performed studies aimed at the development of materials for applications in metallization with improved thermal ability. The work focused on synthesizing thin monocrystalline films of Ti_3SiC_2 by means of high-temperature magnetron sputtering. The studies were performed on layers grown by sputtering from Ti, C and Ti-Si-C composite targets and by sputtering from three targets (Ti, C and Si). In the first case the influence of C content in the TiC buffer layer on the crystal structure of Ti-Si-C layer grown from compositional target is reported. In the second case the influence on the stoichiometry of the formed phases, changes of the power applied to the different targets is discussed. Although Ti_3SiC_2 is the most studied among the MAX phases, there are no reports focused on the mechanisms of thin-film formation at the atomic level. The characterization of the layers was performed by X-ray diffraction methods (XRD) and subsequently by X-ray absorption (XAS). In most of the cases the XRD studies showed many disagreements with the assumed long range crystalline order. Therefore, the XAS an atomic sensitive probe was applied as the most suitable technique to examine the atomic order around Ti atoms.

The XRD for layers grown for the series of samples with different power applied for three independent targets are presented in Fig. 1. One can notice that the shape of the diffraction pattern is changing depending on the applied power. However, only in case of samples marked as C113 and C117 the peak (small and sharp and high and broad, respectively) which can be related to Ti_3SiC_2 phase was detected.

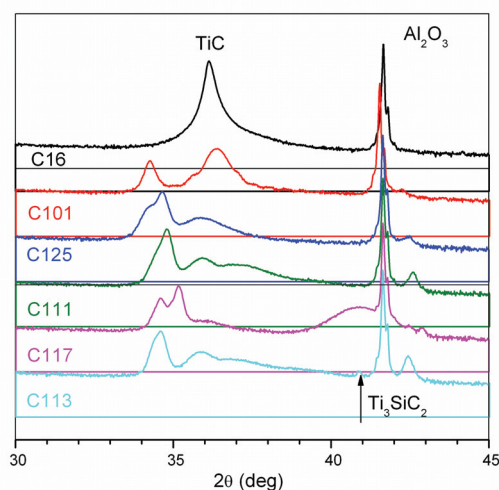


Figure 1. The XRD results for samples produced with different power at three targets. The diffraction peaks from the Al_2O_3 substrate, TiC compound and position of reflection for Ti_3SiC_2 are indicated.

It can be concluded from the performed XAS studies that the creation of the local atomic order around Ti atoms similar to the Ti_3SiC_2 phase was observed but not all atomic positions are fully occupied: (i) at carbon atoms position, where 3.6 atoms should be located, there are about $1 \div 2$ vacancies; (ii) in case of silicon, instead of 1.2 atoms there are almost 3 atoms and 6 in the case of the C125

sample. It indicates that some other phase (like TiSi_2) coexists with the MAX phase; (iii) there is a lack of Ti atoms in all the MAX like phases produced - at the distance 2.99 Å and 3.09 Å there should be 4.8 and 6 Ti atoms, respectively. XAS analysis showed only $3 \div 5$ Ti atoms in both positions together. The example of modelling for sample C125 is shown in Fig.2. In the case of samples grown from the three elemental targets many vacancies in the position of C and Ti were also detected. The crystallographic phases found by XRD cannot be unambiguously ascribed to the known crystal structures.

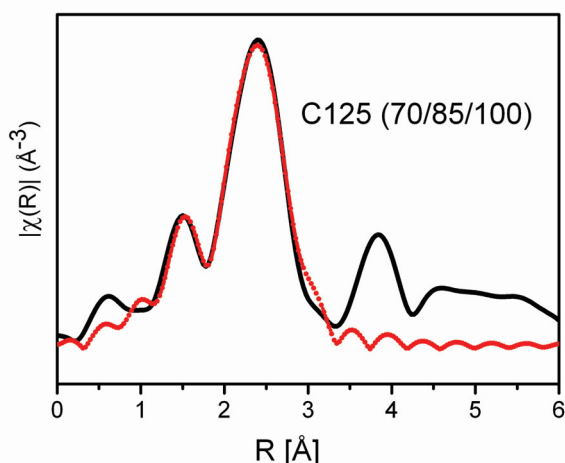


Figure 2. The magnitude of Fourier transformation of EXAFS oscillations for the C125 sample (black line) and fit to the model (red - dotted line). The numbers in the brackets denote the power fed to the Ti/Si/C targets respectively.

The performed EXAFS analysis led to the following conclusions for the technological processes. The power fed to produce the Ti_3SiC_2 stoichiometry (MAX phase) in the grown layers was considerably too low at the Ti and C targets. In the case of Si target the power fed was too high, that led to the TiSi_2 – like phase formation. Moreover, the changes of power fed to C and Si targets did not influence the number and positions taken by these atoms.

Acknowledgements: Research in part financed by the European Union within the European Regional Development Fund- project InTechFun. The measurements performed at synchrotron have received funding from the European Community's Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) under grant agreement n° 226716.

15:15

Poster

11

Can we control the process of room temperature ferromagnetic clusters formation in GaMnAs matrix?

Krystyna Lawniczak-Jablonska¹, Jadwiga Bak-Misiuk¹, Anna Wolska¹, Marcin T. Klepka¹, Elzbieta Dynowska¹, Przemysław Romanowski¹, Janusz Sadowski^{1,2}

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland 2. Lund University, MAX-lab, Lund SE-221 00, Sweden

e-mail: jablo@ifpan.edu.pl

Since the prediction of room temperature (RT) ferromagnetic properties in diluted magnetic semiconductors (DMS) [1], in which a stoichiometric fraction of the host semiconductor atoms is randomly replaced by magnetic ions, there is a worldwide search for RT ferromagnetic DMS materials. Due to failure in producing these kind of materials, the increasing interest is devoted to the granular materials being ferromagnetic at room temperature. In the case of GaMnAs, granular material can be easily produced by thermal processing of the low temperature (LT) grown MBE layers. In such materials the ferromagnetic clusters which show RT magnetism are immersed in semiconducting matrix. Recently the possibility to produce the magnetic tunnel junctions with active layer of GaMnAs with the small cubic cluster was demonstrated [2]. Therefore, the new problem arises, how to control the nanoclusters crystallographic structure and size distribution.

In the series of our recent papers [3-5] we demonstrate that the cubic MnAs clusters do not exist. Instead the small cubic GaMnAs clusters are formed with much higher content of Mn than ever produced in GaMnAs layers with randomly distributed Mn atoms. The clusters with size larger than 8 nm have already MnAs hexagonal structure. Moreover, the commonly accepted conditions that annealing of layer up to 500 °C produces exclusively cubic clusters and annealing at 600 °C or higher results in solely hexagonal clusters are not valid. From the performed studies we postulated that the Mn position in the as grown samples plays an important role in the formation of nanoclusters. It is known that in LT grown MBE layers part of the Mn atoms is located in the interstitial positions. It has been shown in paper [6] that in the case of samples with 5-7% content of Mn more than 50% of Mn atoms were located in the interstitial positions. In a recent paper [4] it was found that in such samples already after annealing at 500 °C significant part of Mn atoms formed hexagonal MnAs clusters. In the case of samples with content of Mn at the level of 2-3% almost all Mn atoms were located in substitutional positions already in as grown sample and after annealing even at 600 °C only cubic clusters were observed.

To check directly the influence of the Mn location in as grown samples on the structure of clusters formed during annealing procedure the special set of samples was prepared. The sample with nominal content of Mn 10% and thickness 500 Å was grown at LT and next annealed during 10 hours at 160 °C. This procedure is commonly used to remove the Mn from interstitial positions. Next part of the sample was annealed at 500 °C and part at 600 °C.

The other sample with 3% of Mn was thermal processes according to the standard procedure (500 and 600 °C). The location of Mn was investigated by X-ray absorption spectroscopy and the strain in the layers by a high resolution Philips Material Research diffractometer.

The measurements performed at synchrotron have received funding from the European Community's Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) under grant agreement n° 226716.

Reference

- [1] T. Dietl et al., Science 287 (2000) 1019.
- [2] P.N. Hai et al., Nature 458 (2009) 489.
- [3] K. Lawniczak-Jablonska et al., Phys. Status Solidi RRL 5 (2011) 62.
- [4] K. Lawniczak-Jablonska et al., J. Solid State Chem. 184 (2011)

1530.

[5] K. Lawniczak-Jablonska et al., Phys. Status Solidi B, 1–6 (2011) / DOI 10.1002/pssb.201001187

[6] K. Lawniczak-Jablonska et al., Rad. Phys.Chem., **78** (2009) S80.

15:15	Poster	12
-------	--------	----

Location of metals in ZnO electrospined nanofibers

Krystyna Lawniczak-Jablonska, Joanna Libera, Anna Wolska, Marcin T. Klepka, Anna Baranowska-Korczyn, Krzysztof Fronc, Danek Elbaum

Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

e-mail: jablo@ifpan.edu.pl

The continuous interest in ZnO based materials is caused by a promising properties which can be used in electronic and optoelectronic nanodevices. ZnO based nanostructures and particularly nanofibers are bio-safe and biocompatible. Some of their unique properties have been already successfully exploited in biological applications [1,2,3]. The most remarkable use of these oxides is found in catalysis, construction of gas sensors, and in cosmetic and pharmaceutical industries. Many properties of ZnO depends on dopants, therefore, the broad interest received ZnO based structures with metallic dopants. These dopants change the conductivity of materials from insulating to metallic, their piezoelectricity, introduce room-temperature ferromagnetism and modulate chemical sensing properties. As a result of the oxide diverse applications there is continuous searching for novel methodology to synthesize a homogeneous ZnO nanocrystals doped with metals.

The presented studies are aimed to locate Mn and Fe dopants in the ZnO nanofibers fabricated by electrospinning method. Electrospinning has been recognized as an efficient technique for the fabrication of polymer nanofibers [4]. In the electrospinning process a suspension in polymer of zinc acetate with appropriate addition of dopant metals acetates was used, followed by calcination in air, at 500°C for 4 h. The X-ray absorption method, as the element sensitive, was chosen to estimate the metal location in studied samples. The nominal content of Fe and Mn in the samples was at the level of 10 %. The electrospined thin layer of samples were deposited on the Si substrate. The K edges of Zn, Mn and Fe were measured at C and E4 stations in Hasylab, Hamburg. The Fe and Mn $L_{3,2}$ edges were measured at the I-1011 beamline at MAX-lab, Sweden. The spectra were collected in the fluorescence mode for K-edges and total electron yield for L-edges.

The electron yield technique is surface sensitive, therefore, the result of the measurements at the L-edges represent the near-surface region of the samples. The features characteristic for Mn and Fe oxides dominates in the spectra. This is consistent with the presence of nano-exclusions (20-25 nm²) seen by scanning electron microscopy.

The Zn K-edge EXAFS spectra measured on zinc oxide nanofibers without doping confirm powder wurtzite structure typical for ZnO. In the case of the doped samples we found that around half of Zn atoms the local atomic order was changed by presence of a dopant in the second coordination sphere. From the Fe and Mn K-edges, it was established that close to 10% of all dopant atoms formed the com-

mon oxides, while about 90% of dopants substituted Zn atoms in the wurtzite ZnO structure. Such substitution introduced the local distortion of the lattice. Nevertheless, even such a small content of Mn and Fe oxides can significantly change the properties of materials, particularly magnetic ones.

The measurements performed at synchrotron have received funding from the European Community's Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) under grant agreement n° 226716.

Reference

1. Medintz, I. L.; Uyeda, H. T.; Goldman, E. R.; Mattoussi, H. *Nat. Mater.* 2005, 4, 435–446.

2. Alivisatos, A. P. *Science* 1996, 271, 933–937.

3. Bruchez, M., Jr.; Moronne, M.; Gin, P.; Weiss, S.; Alivisatos, A. P. *Science* 1998, 281, 2013–2016.

4. Deitzel JM, Kleinmeyer J, Hirvonen JK, Beck TNC. *Polymer* 2001;42:8163–70.

15:15	Poster	13
-------	--------	----

Synchrotron topographic studies of domain structure in Czochralski grown $\text{Pr}_x\text{La}_{1-x}\text{AlO}_3$ crystals

Krzysztof Wieteska¹, Wojciech Wierzchowski², Agnieszka Malinowska², Sebastian Turczynski², Maria Lefeld-Sosnowska³, Dorota A. Pawlak², Tadeusz Łukasiewicz², Carsten Paulmann⁴

1. Institute of Atomic Energy POLATOM, Świerk 05-400, Poland

2. Institute of Electronic Materials Technology (ITME), Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland 3. Warsaw University, Institute of Experimental Physics (IEP UW), Hoża 69, Warszawa 00-681, Poland 4. University of Hamburg, Mineralogisch-Petrographisches Institut, Hamburg, Germany

e-mail: malinows@if.pw.edu.pl

The real structure of $\text{Pr}_x\text{La}_{1-x}\text{AlO}_3$ ($x = 1, 0.75, 0.55, 0.4$ and 0) and LaAlO_3 doped with Pr single crystals was characterized with a number of methods including conventional and synchrotron X-ray diffraction topography, and polariscopic micrography. The surface of the samples has been also investigated with a high resolution profilometer.

The crystals were grown by Czochralski technique [1]. High purity Pr_2O_3 , Al_2O_3 and La_2O_3 oxides (99.995%) were used as raw materials. All components were mixed in stoichiometric ratios. The pulling and rotation rates were in the range of 1-1.7mm/h and 6-8 rpm. The crystals have been grown in pure nitrogen atmosphere. The samples were cut out perpendicularly to the $\langle 100 \rangle$ pseudo-cubic axis closest to the actual growth direction.

The presently applied sample orientation allowed precise recognition of domain systems, and determination of the orientation of the lattice connected with the domains.

It has been confirmed that the domains are of a twin character, similar as it was described by Dudley and Yao in LaAlO_3 and LaGaO_3 crystals [2]. In those crystals the twin configuration and their changes were studied as a function of temperature in the vicinity of phase transition temperatures.

The domain systems, observed by us, were investigated in

AlO_3 (for different x) and in LaAlO_3 crystals doped with Pr, and their appearance and configuration were compared for samples, containing different amount of Praseodymium. The observed twin domains systems were located along $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ (pseudo-cubic) directions. The evaluated changes of the lattice orientation depend on the chemical composition of the samples. The representative back-reflection white beam synchrotron radiation topograph of the LaAlO_3 crystal is shown in Fig.1. The important advantage of the white beam transmission section topography was the possibility of proving that the domain systems are perpendicular to the sample surface (Fig.2).

The details of the domain structure were well revealed in polariscopic micrographs. It was also possible to reveal them by means of the profilometer. The observed surface relief is most probably caused by different mechanical or chemical polishing of differently oriented materials inside the domains.

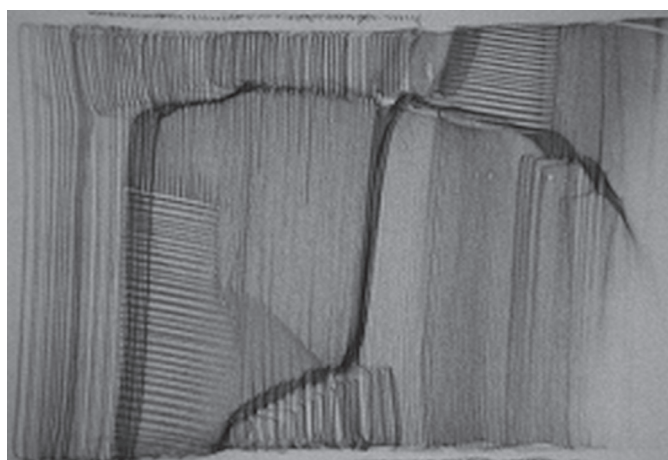


Figure 1. The representative projection back-reflection topograph of the LaAlO_3 revealing the domain structures along two perpendicular planes.



Figure 2. The transmission white beam section topograph of the LaAlO_3 . The vertical location of the domains proves their perpendicularity to the surface of the sample.

The synchrotron investigations were supported by the HASYLAB project II-20060165 EC.

References

- [1] S. Turczynski, K. Orlński, D. A. Pawlak, R. Diduszko, J. Mucha, M. Pekala, J.F. Fagnard, Ph. Vanderbemden, M.A. Carpenter, *Cryst. Growth & Design*. **11** (2011) 1091-1097.
- [2] M. Dudley, G-D Yao: *J. Phys. D*: **26** (1993) A120-A125.

15:15

Poster

14

Application of synchrotron-radiation X-ray tomographic microscopy (SRXTM) to visualisation of petrified wood samples

Jakub K. Nowak¹, Federica Marone², Andrzej Kuczumow¹

1. The John Paul II Catholic University, Department of Chemistry (JPPII-KUL), al. Raławickie 14, Lublin 20-950, Poland **2.** Laboratory for Developments and Methods, Paul Scherrer Institut, Villigen PSI 5232, Switzerland

e-mail: nowakj@kul.pl

The petrified wood, known from many locations in the World, has been formed through interaction of fallen and buried wood with its environment. The formation processes have lasted thousands or millions of years. The petrification process involved several inter-reactions between organic matrix components of wood and environmental solutions consisting of several different inorganic/mineral substances such as silica, calcium carbonate, calcium phosphate. The final effect is unusual because three dimensional replicas of wood have been created with well preserved cell microstructures (see Fig. 1).

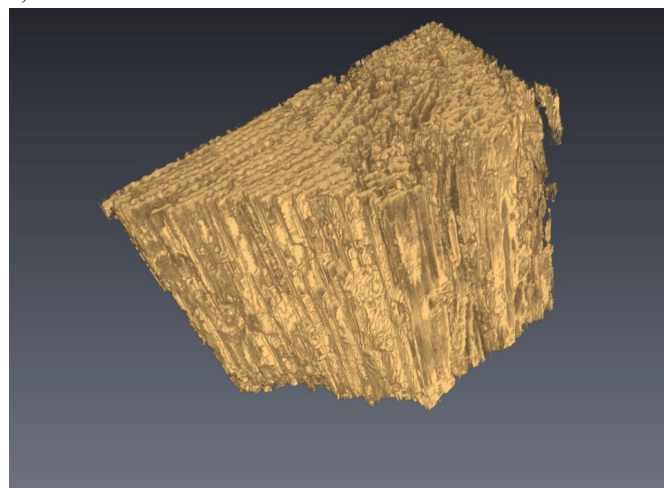


Fig.1. Micro-tomography picture of well preserved petrified wood from Dunarobba.

The present work involves synchrotron based X-rays micro-tomography studies of two different petrified woods originating from Dunarobba (central Italy) and from Republic of South Africa. Analyses were made at X-rays Tomographic Microscopy localized at TOMCAT beamline at Swiss Light Source synchrotron at Paul Scherrer Institut (PSI). This method perfectly permits to visualize the localization and distribution of phases in the saved cell and tissues (Figure 2).

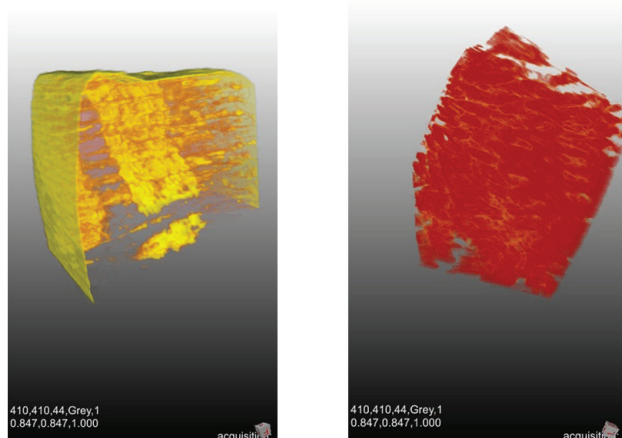


Figure 2. Distribution of detected main phases in petrified wood from Republic of South Africa. The left image illustrate the localization of calcite (Calcite) and right apatite (Apatite), respectively, in the mineralized wood tissue.

The present results demonstrate the excellent possibilities of high-resolution X-ray Tomographic Microscopy (TOMCAT) approach in petrified and mineralized wood studies. Microtomography can help in understanding of the successive stages of the petrification process, namely, of the infiltration of solutions and crystallization of inorganic compounds in organic wood matrix. The method may be successfully used for studies of artificial petrification and impregnation processes and in related processes of material processing.

15:15

Poster

15

X-ray photoemission from CdTe/PbTe/CdTe nanostructure in normal and grazing-incidence modes

Bronisław A. Orlowski¹, Jerzy Pelka¹, Piotr Dziawa¹, Sigitas Mickevicius², Anna Reszka¹, Bogdan J. Kowalski¹, Sebastian Thiess³, Wolfgang Drube³

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Semiconductor Physics Institute, A.Gostauto 11, Vilnius LT-2600, Lithuania **3.** Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB (HASYLAB), Notkestrasse 85, Hamburg D-22603, Germany

e-mail: orbro@ifpan.edu.pl

The grazing incidence X-ray photoemission spectroscopy (XPS) of near surface region of bulk materials is sensitive to the composition variation with depth and provides information about surface chemical composition. The technique has been recognized to be particularly useful to the study of near-surface parts of materials below c.a. 4 nm, using soft X-rays [1].

In case of multilayer nanostructures (ML) a variant of the grazing incidence XPS which exploits an angle-dependent E-field intensity enhancement in the films is feasible. It follows the fact, that in the multilayer structure, the photon beam impinging on the sample surface above the critical angle undergoes partial reflections on all interfaces in the ML structure, with the resulting X-ray standing wave (XSW) formation in the sample volume. The XSW field is modulated by the angle of grazing photon beam incidence.

The E-field amplification depends on simple geometrical and elec-

tron density relations of ML components, reaching its extreme in case of so called resonant structures of planar X-ray waveguide [2]. As the intensity of PE spectra is directly proportional to a local E-field intensity, the technique can provide enhanced information about distribution of photoemitting atoms, in the ML structure, in particular from buried layers. In the present work we demonstrate the method by comparison of a developed theoretical model and experimental XPS spectra obtained for the CdTe/PbTe/CdTe nanostructure. PbTe is a narrow-gap semiconductor widely used for mid-infrared lasers and detectors. Due to its thermoelectric properties the material is used also for small-scale cooling applications as well as for power generation in remote areas [3].

To evaluate an account of angle-dependent X-ray standing wave field generated in ML to the XPS intensity we developed a theoretical model. First, E-field distribution in function of grazing angle of incidence and sample depth has been calculated for ML sample with IMD 4.1.1, an extension to XOP software by David Windt [4, 5]. The resulting matrix of E-field values, of dimensions 100 x 1200 (depth from 0 to 10 nm x angle from 0 to 4 degrees). The E-field values were then applied as input data to calculate the angular dependence of integrated photoelectron intensity, PE, according to a number of simple models of photoelectron emission. The overall formula for the intensity of elastic photoelectrons due to the transition type s , excited in atom species A , distributed in a multilayer structure Φ , with an in-depth density distribution function $\rho_A(z)$, was assumed to be:

$$P_E = I_A^s(\theta) \cong \Omega(A, \theta) +$$

$$+ \int_{\Phi} dz \exp(-z/e_d) \cdot E_f(z, \theta) \cdot Y_A^s \cdot \rho_A(z) \cdot R(z)$$

Here: e_d – escape depth of the electrons, Y – photoelectron yield. Integration extends over the sample thickness up to the depth, from where photoelectron signal is negligible. Terms Ω and R stand for effects not included in the models presented here. To obtain information about general properties of the photoelectron current intensity in function of angle, we set $\Omega = 0$, R and $Y = 1$. We assumed the escape depth to be independent of layer density and composition as well. An example of calculated E-Field distribution is shown in Fig. 1. The angular dependence of PE current calculated for Te distribution is shown in Fig. 1 (solid line). The PE current calculations in function of photon beam angle of incidence were performed in Matlab with a program written by us.

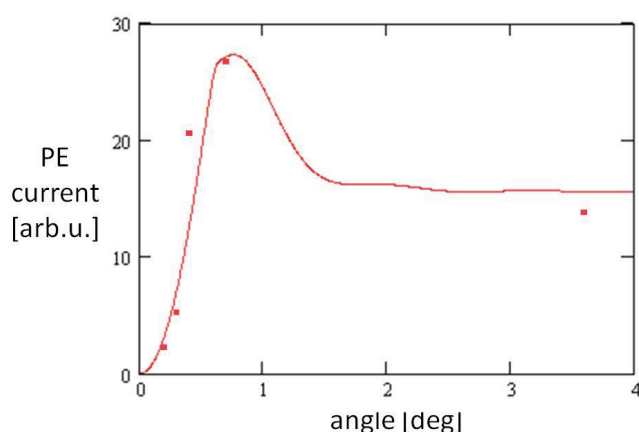


Fig. 1. (Solid line): Angular dependence of photoelectron current, calculated for the Te distribution in the layered sample. Integration was performed in the domain of $z < 0,90$ nm. (Scattered points): Experimental intensity of PE current, taken from measurements of sample 147-10CdTe-PbTe_QW recorded at station BW2 HASYLAB DESY. The last one experimental point (shown here at angle of c.a. 3.6°) is actually measured at 45° and shifted for a comparison.

To demonstrate the effect experimentally we measured the set of spectra containing: valence band, Cd 3d and 4d, Pb 4f and 5d, Te 3d and 4d for different angles of incident photon beam.

The nanostructure was grown by MBE deposition at the Institute of Physics, Polish Academy of Sciences in Warsaw. The CdTe buffer layer (45 nm thick) was evaporated on GaAs (100) wafer and PbTe layer (6 nm thick) was evaporated on it. The layer of PbTe was covered by CdTe layer of thickness 3 nm. The details of preparation can be found elsewhere [6].

The experiment was performed using the Tunable High Energy X-ray Photoemission Spectrometer (THE-XPS) at wiggler beam line station BW2 of the HASYLAB, DESY, Hamburg, Doris III storage Ring. Double crystal monochromator (Si(111)) covers an energy range from 2,4 to 10 keV with a monochromatic photon flux of about 5×10^{12} photons/s and with total energy resolution power of 0,5 eV. The experimental results are shown in fig 2.

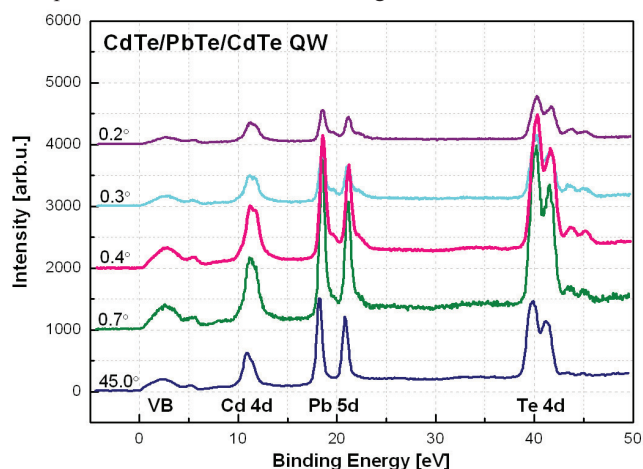


Fig. 2. Photoelectron spectra obtained at various angles of photon beam incidence shown in the left side of figure. Notice the X-ray

convention of beam angle values, starting from the sample surface.

In Fig 1 the experimental results (scattered points) are compared with the above mentioned theoretical model (solid line). A systematic shift in experimental intensity of the order of 0.1° was found by comparison with theoretical model. It was explained by error in goniometer adjustment. The intensity of Cd 4d peak shows at small angles, below the critical angle, values that can indicate for an increased concentration of the cadmium atoms at the surface; this points needs a careful further investigation.

These preliminary results indicate that, in case of ML nanostructures, the angular characteristics of PE emission can provide important information about the sample structure including its homogeneity. It can also help to determine experimental conditions suitable to enhance the photocurrent intensity. To approach this goal, further work on refining the mathematical model based on a detailed comparison with experimental results is planned.

Acknowledgments: The authors acknowledge support by MSHE of Poland research Projects DESY/68/2007 and by the European Community via the Research Infrastructure Action under the FP6 Structuring the European Research Area" Programme (through the Integrated Infrastructure Initiative "Integrating Activity on Synchrotron and Free Electron Laser Science") at DESY.

References

- [1] T. Jach, M.J. Chester, S.M. Thurgate; Grazing incidence X-ray photoemission and its implementation on synchrotron light source X-ray beamlines, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A 347 (1994) 507-509.
- [2] J.B. Pelka, A. Cedola, S. Lagomarsino, S. Di Fonzo, W. Jark, G. Soullie; Application of Resonance-Enhanced X-Ray Propagation Effect to the Study of Layered Structures by GIXR and Secondary Radiation, J. Alloys Compds. 286 (1999) 313-321
- [3] M. Bułka, P. Sankowski, R. Buczek, P. Kacman; Crystal and electronic structure of PbTe/CdTe nanostructures, Nanoscale Res. Lett. 6 (2011) 126-132
- [4] D. L. Windt, IMD - Software for modelling the optical properties of multilayer films, Comput. Phys. 12 (1998) 360-370.
- [5] B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at E-50-30,000 eV, Z=1-92, Atomic Data and Nuclear Tables 54 (1993)
- [6] M. Szot, L. Kowalczyk, E. Smajek, V. Domukhovskii, J. Domagała, E. Lusakowska, B. Taliashvili, P. Dziawa, W. Knoff, M. Wiater, T. Wojtowicz, T. Story, Epitaxial Growth and Optical Properties of PbTe/CdTe Semiconductor Heterostructures, Acta Phys. Polon. A 114 (2008) 1391-1396.

Thermal expansion of Si_3N_4 and Ge_3N_4

Roman Minikayev¹, Wojciech Paszkowicz¹, Paweł Piszora², Michael Knapp³, Carsten Baecht³

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry, Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland **3.** Technische Universität Darmstadt, Institute of Materials Science, Petersenstr. 23, Darmstadt 64287, Germany

e-mail: paszk@ifpan.edu.pl

Si_3N_4 and Ge_3N_4 belong to a family of nonoxide ceramics. They exhibit unique physico-chemical and mechanical properties making them suitable for various applications. Si_3N_4 exhibits superior thermomechanical and physicochemical properties such as oxidation and thermal shock resistance, mechanical fatigue, creep and wear resistance, high fracture toughness, it is chemically inert and hydrophobic. Ge_3N_4 is known to be thermally stable and resistant to oxidation, its photocatalytic behavior has been reported. Their applications include the use for surface protection [1] (both compounds), in engine components and turbochargers, bearings, metal cutting and shaping tools and hot metal handling [2], interlayer dielectrics for metal-insulator-semiconductors devices, metal-nitride-oxide-semiconductors and as passivation films or diffusion masks [3] (Si_3N_4), in photodiodes, amplifiers [1], metal-insulator-semiconductor field effect transistors (MIS FET) [4], waveguides [5] Li-ion batteries [6], and as photocatalysts [7] (Ge_3N_4).

In the present study, thermal expansion of Si_3N_4 and Ge_3N_4 polymorphs is experimentally determined and discussed on the basis of literature data. Two Si_3N_4 samples and one Ge_3N_4 sample (ALDRICH) were studied.

The study was performed under low- and high-temperature conditions by X-ray diffraction, at a synchrotron-radiation source. The diffraction studies were carried out at a powder diffractometer [8] at the B2 (HASYLAB/DESY) bending-magnet beamline, using the Debye-Scherrer geometry. An imaging-plate detector was applied for the data collection. The Rietveld-refinement program Fullprof 2.k (v 2.7) [9] was used for the structural analysis. The quantitative analysis yielded the following proportions of α and β polymorphs in the samples: 92:8, 9:91 (samples of Si_3N_4) and 27:73 (sample of Ge_3N_4). The temperature variation of lattice parameters, atomic positions and thermal expansion of α and β nitride show smooth trends. It is concluded that despite the fact that each sample was built from two phases, a combination of applied experimental conditions with the careful analysis using the Rietveld method leads to acceptable values of thermal expansion in the broad temperature range studied.

References

- [1] B. Molina, L.E. Sansores, "Electronic structure of Ge_3N_4 possible structures," *Int. J. Quant. Chem.* 80 (2), (2000) 249-257 (Spec. Issue: Third Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Ed: M. Castro, J. Ladik, C. Bunge).
- [2] R. Katz, "Commercial applications of silicon nitride based ceramics," *Mater. Technol.* 8 (1993) 142-148.
- [3] C. Juang, J.H. Chang, R.Y. Hwang, "Properties of very low tem-

perature plasma deposited silicon nitride films," *J. Vac. Sci. Technol. B* 10 (1992) 1221-1223.

- [4] K.P. Pande, "Electrical characteristics and memory behavior of Ge_3N_4 -GaAs MIS devices," *Solid-State Electron.* 25 (1982) 145-149.
- [5] W. Stutius and W. Streifer, "Silicon nitride films on silicon for optical waveguides," *Appl. Opt.* 16 (1977) 3218-3222.
- [6] N. Pereira, M. Balasubramanian, L. Dupont, J. McBreen, L.C. Klein, G.G. Amatucci, "The electrochemistry of germanium nitride with lithium," *J. Electrochem. Soc.* 150 (8), (2003) A1118-A1128.
- [7] T. Watanabe, J. Sato, T. Takata, M. Hara, M. Yoshimura, H. Kobayashi, Y. Inoue, "Development of highly efficient photocatalyst, Ge_3N_4 , using high pressure treatment," *Nippon Kagakkaï Koen Yokoshu* 84 (1) (2004) 479.
- [8] M. Knapp, C. Baecht, H. Ehrenberg and H. Fuess, "The synchrotron powder diffractometer at beamline B2 at HASYLAB/DESY: status and capabilities," *J. Synchrotron Rad.* 11 (2004) 328-334.
- [9] J. Rodriguez-Carvajal, "Recent Developments of the Program FULLPROF" *IUCr Newslett.* 26 (2001) pp. 12-19.

Local structure around Te in heavily doped GaAs:Te using X-ray absorption fine structure

Anna Pietnoczka¹, Rajmund Bacewicz¹, Tomasz Slupinski², Jerzy Antonowicz¹, Su-Huai Wei³

1. Warsaw University of Technology, Faculty of Physics, Koszykowa 75, Warszawa 00-662, Poland **2.** Warsaw University, Faculty of Physics, Hoża 69, Warszawa 00-681, Poland **3.** National Renewable Energy Laboratory (NREL), 1617 Cole Blvd, Golden, CO 80401, United States

e-mail: pietnoczka@if.pw.edu.pl

The annealing of heavily doped GaAs:Te can significantly change the value of the free electron concentration in a reversible manner. These changes of electrical properties are accompanied by the structural changes of GaAs:Te solid solution [1]. In this contribution we present an attempt to determine local changes around Te atoms for different states of the GaAs:Te crystals caused by the annealing corresponding to different electron concentrations.

Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS) and X-ray Absorption Near Edge Structure (XANES) techniques have been employed to investigate the local structure around tellurium atom and its valence. Tellurium K-edge absorption has been measured in a fluorescence method at the X1 beamline in the HASYLAB. The samples were kept at the temperature of 80 K in order to minimize the thermal disorder.

Various models of Te defect complex have been used to fit the data for low concentration state: $\text{V}_{\text{Ga}} - \text{Te}_{\text{As}}$ complexes [2], $\text{Te}_{\text{As}} + \text{Te}_{\text{As}}$ pairs [1], as well as several DX_{GaAs} -like configurations of tellurium. DX configurations have been calculated using density functional theory (DFT). The EXAFS and XANES spectra for different Te location have been simulated and compared with the experimental data. Multi-parameter fitting of the EXAFS data provided information on the local structure around Te (the bond lengths, the coordination

numbers and Debye-Waller factor). The charge state of Te has been determined from the XANES data. The EXAFS and XANES were useful for ruling out the possibility of existence of GaTe and Ga₂Te₃ precipitations.

This work was supported by the Polish State Committee for Scientific Research, Project No.IP2010 031370.

References

- [1] T. Słupiński, E. Zielińska-Rohozińska, "Local order of Te impurity atoms and free electron concentration in heavily doped GaAs:Te," *Thin Solid Films* 367 (2000) 227-231.
- [2] D.T.J. Hurle, "A comprehensive thermodynamic analysis of native point defect and dopant solubilities in gallium arsenide," *J. Appl. Phys.* 85 (1999)6957-7012.

15:15	Poster	18
-------	--------	----

Studies of gemini surfactants as nanocarriers for siRNA

Zuzanna Pietralik, Maciej Kozak

Department of Macromolecular Physics, Faculty of Physics,
Adam Mickiewicz University, Umultowska 85, Poznań 61-614,
Poland

e-mail: zuzannap@amu.edu.pl

siRNA is a double-stranded RNA molecule with a length of about 20-25 base pairs, which is involved in the RNA interference process that consists in silencing of specific genes expression. The oligomers of siRNA have particular importance in gene therapy [1]. Gene therapy is extremely promising therapeutic method for the treatment of tumor, genetic disorders, neurodegenerative, autoimmune and infectious diseases. Very important in gene therapy is a delivery system (also known as vector), which improves the delivery of the new DNA or si-RNA into cells and protects the genetic material against degradation. A promising alternative to currently used vectors based on viruses seems to be gemini surfactants [2]. Such molecules have been recently an object of intense studies because they are characterized by low level of cytotoxicity and high transfection efficiency [3].

A series of SAXS studies were performed on a group of gemini surfactants which are quaternary salts (butane-, hexane- and pentane(bis-alkyloxyimidazolium) chlorides) mixed with single-stranded siRNA oligomers with a length of 21 base pairs (UGCAGGAUUCGAUGGAACCUU), to obtain four different values of N/P – the ratio of negative (siRNA) to positive charge (surfactant).

A series of the SAXS data sets were collected in DESY, at EMBL Beam Line X33 (Hamburg, Germany) [4], using synchrotron radiation ($\lambda=0.15$ nm) and Pilatus photon counting detector. Measurements were done at 20 °C for the range of the scattering vector $0.05 < s < 5.0$ nm⁻¹. All data sets were normalized to the intensity of the incident beam, corrected for detector response and scattering of the buffer was subtracted using PRIMUS [5].

On the basis of SAXS data the shape and symmetry of mixed siRNA/gemini surfactant systems were evaluated. The group of tested surfactant forms stable complexes with siRNA molecules. SAXS data indicate that the obtained lipoplexes form probably unilamellar micelles.

The research was supported by research grant from the Ministry of Science and Higher Education (Poland) (Grant No. N N204 135738).

References

- [1] A. Schroeder, C. G. Levins, C. Cortez, R.Langer, D. G.Anderson, *J Intern Med.*; 2672010: 9–21
- [2]S.D. Wettig, R. Deubry, J. Akbar, T. Kaur, H. Wang, T. Sheinin, J.W. Joseph, R.A. Slavcev, *Phys Chem Chem Phys* 12, (2010) 4821-6
- [2]. P.Luciani, C.Bombelli, M. Colone, L. Giansanti, S.J. Ryhanen, M.J. Saily, G. Mancini, P.K.J. Kinnunen, *Biomacromolecules*, 8, (2007) 1999-2003
- [3] L.Karlsson, M.C.P. van Eijk, O.Soderman, *J. Coll. Int. Sci.* **252**, (2002) 290-296
- [4] M.W. Roessle, R. Klaering, U. Ristau, B. Robrahn, D. Jahn, T. Gehrman, P. Konarev, A. Round, S. Fiedler, C. Hermes, D.I. Svergun, *J. Appl. Crystallogr.* **40**, (2007) 190-194.
- [5] P.V. Konarev, V.V. Volkov, A.V. Sokolova, M.H.J. Koch, D.I. Svergun, *J. Appl. Crystallogr.* **36** (2003) 1277-1282.

15:15	Poster	19
-------	--------	----

Interactions between zwitterionic surfactants and DM-PC

Zuzanna Pietralik¹, Daria Wieczorek², Ryszard Zieliński², Maciej Kozak¹

1. Department of Macromolecular Physics, Faculty of Physics,
Adam Mickiewicz University, Umultowska 85, Poznań 61-614,
Poland **2.** Department of Technology and Environmental Protection,
Faculty of Commodity Science, University of Economics,
Aleja Niepodległości 10, Poznań 60-967, Poland

e-mail: zuzannap@amu.edu.pl

Betaines are zwitterionic organic compounds, which means that in their structure, we can distinguish positively charged and negatively charged functional groups. Sulfobetaines are analogues of betaines in which the anion is a sulfonic group. Therefore the surfactants based on sulfobetaine derivatives are amphoteric molecules composed of hydrophilic and hydrophobic moieties, so they tend to form associates in the aqueous environment. Understanding the interactions between sulfobetaines, and phospholipids, which are one of the major components of biological membranes, is an important issue for biophysics, gene therapy or nanotechnology. Such mixed systems can be used as drug delivery systems, nucleic acids, or as a component of the shell quantum dots [1-3].

The aim of this study was to determine the effect of two novel zwitterionic surfactants with the sulfobetaine structure on the stability of model systems of biological membranes based on phosphatidylcholine derivative. The studies were performed on 1,2-dimyristoyl-sn-glycero-3-fosfatydylocholine (DMPC) and 4-(N-octylmorpholine)-1-butansulfonate (OMBS) and 4-(N-decylmorpholine)-1-butansulfonate (DMBS).

The small angle X-ray scattering data were collected at the Beam Line 1911-4 at the MAXII storage ring of the MAX-Lab (Lund, Sweden) using the synchrotron radiation ($\lambda=0.091$ nm) and the Mar-CCD 165 mm detector. The transmission SAXS measurements were performed at temperatures ranging from 6 – 30°C. The scattering pattern for the buffer solution (background scattering) was collected before and after data collection for all phospholipid samples. The scattering vector range was $0.1 < s < 4 \text{ nm}^{-1}$ (where $s=4\pi\sin\theta/\lambda$). All data obtained were normalized to the intensity of the incident beam, corrected for detector response and the buffer scattering was subtracted using computer programs BLI7-11 [4] and PRIMUS [5].

The results showed that the addition of sulfobetaines causes destabilization of lamellar structures characteristic for fully hydrated derivatives of phosphatidylcholine and gradually induces the formation of mixed liposomes. The presence of surfactants also affects the main phase transition temperature (the phase transition from gel to liquid crystalline phase).

The presented studies were performed with financial support of the Ministry of Science and Higher Education (Grant No. NN202 248 935).

References

- [1] Muro, E., et al., *Journal of the American Chemical Society*. **132**(13): p. 4556-4557.
- [2] Zhang, Z., S. Chen, and S. Jiang, *Biomacromolecules*, 2006. **7**(12): p. 3311-3315.
- [3] Dai, F. and W. Liu, *Biomaterials*. **32**(2): p. 628-638.
- [4] Knaapila, M., et al., *Journal of Synchrotron Radiation*, 2009. **16**(4): p. 498-504.
- [5] Konarev, P.V., et al., *Journal of Applied Crystallography*, 2003. **36**(5): p. 1277-1282.

15:15	Poster	20
-------	--------	----

Structural changes of DMPC bilayers induced by gemini surfactants

Zuzanna Pietralik¹, Andrzej Skrzypczak², Maciej Kozak¹

1. Department of Macromolecular Physics, Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University, Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland **2.** Institute of Chemical Technology and Engineering, Poznań University of Technology, Marii Skłodowskiej-Curie 2, Poznań 61-542, Poland

e-mail: zuzannap@amu.edu.pl

Dimyristoylphosphatidylcholine (DMPC) is a phospholipid commonly occurring in biological membranes. Fully hydrated DMPC undergoes well-characterised thermotropic phase transitions. Gemini surfactants (also known as dimeric surfactants) are amphiphilic compounds composed of two conventional (monomeric) surfactants moieties connected by the so-called spacer group. They have several characteristics that distinguish them from their monomeric counter-

parts. The most important include increased surface activity or even 1000 times smaller value of the CMC (critical micelle concentration) [1-3].

Gemini surfactants interacting with phospholipids can strongly affect their structural behavior, even at very low concentration. Therefore the physicochemical properties of that group of mixed systems can be easily modified. They can be relevant in the pharmacy, cosmetics industry, bionanotechnology, in the development of NMR research of membrane proteins but they also can be used for the delivery of DNA into the cell [4].

The aim of this study was to analyze the impact of alkoxyderivatives of bisimidazolium quaternary salts at various concentrations on the structure and phase stability of DMPC in aqueous solutions. All studied gemini compounds possess side chains with the same length but differ in spacer group and type of side chains (linear or cyclic).

The presented data has been collected at Beam Line 911-4 at MAX-lab in Lund, (Sweden). The scattering data were recorded in the temperature range 6-30 °C using the synchrotron radiation ($\lambda=0.091$ nm) and the Mar 165 CCD detector. The scattering vector range was $0.05 < s < 4 \text{ nm}^{-1}$. All sets of data have been processed (normalized to the intensity of the incident beam, corrected for detector response and scattering was subtracted from the buffer) using computer programs BLI7-11 [5] and PRIMUS [6].

The addition of the studied surfactants has caused a gradual perturbation of the lamellar phase typical for DMPC and eventually, for the highest surfactant concentration, the formation of the unilamellar vesicles – bicellar phase (the observed scattering patterns of DMPC/surfactant systems are very similar to the SAXS patterns reported for the bicellar DMPC/DHPC systems). Also the temperature range of the main phase transition of DMPC was shifted towards lower temperatures with increasing surfactant concentration.

The research was supported by research grant the Ministry of Science and Higher Education (Grant No. N N204 135738).

References

- [1] R. Zana, *Advances in Colloid and Interface Science* **97** (2002) 205-253.
- [2] P. Tyagi, R. Tyagi, *Tenside Surfactants Detergents* **46** (2009) 373-382.
- [3] S.K. Hait, S.P. Moulik, *Current Science* **82** (2002) 1101-1111.
- [4] S.D. Wettig, R.E. Verrall, M. Foldvari, *Curr. Gene Therapy* **8**. 9 (2008).
- [5] M. Knaapila, C. Svensson, J. Barauskas, M. Zackrisson, S.S. Nielsen, K.N. Toft, B. Vestergaard, L. Arleth, U. Olsson, J.S. Pederesen, Y. Cerenius, *J. Synchr. Radiat.* **16** (2009) 498-504
- [6] P.V. Konarev, V.V. Volkov, A.V. Sokolova, M.H.J. Koch, D.I. Svergun, *J. Appl. Crystallogr.* **36** (2003) 1277-1282.

Resonant photoemission study of Sm atoms on ZnO surface

Anna Reszka¹, Bronisław A. Orlowski¹, Łukasz Wachnicki¹, Sylwia Gierałtowska¹, Elżbieta Guzewicz¹, Bogdan J. Kowalski¹, Marek Godlewski^{1,2}, Robert L. Johnson³

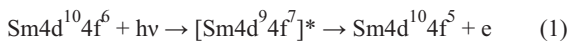
1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Cardinal Stefan Wyszyński University, College of Science, Warszawa, Poland **3.** University of Hamburg, Institute for Experimental Physics, Luruper Chaussee 149, Hamburg D-22761, Germany

e-mail: reszka@ifpan.edu.pl

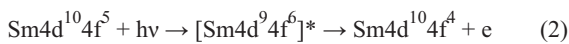
Apart from optoelectronic applications due to its intense ultraviolet near-band-edge luminescence, zinc oxide is also considered as a host material for doping with optically active impurities (such as rare-earth ions [1-2]) in view of expanding the luminescence range into the visible light spectrum. In the present work we investigate properties of ZnO doped with Sm. Samarium is a very interesting dopant for photoemission studies because its divalent and trivalent configurations are characterized by distinct and well separated photoemission features. The multiplet corresponding to the initial $4f^6$ configuration is identified within 5 eV of the Fermi level while the multiplet associated with the initial $4f^5$ configuration appears between 5 eV and 10 eV below the valence band edge. Moreover, Sm^{2+} and Sm^{3+} ions produce quite different luminescence spectra [3].

The ZnO samples were grown by atomic layer deposition (ALD) in the Institute of Physics Polish Academy of Sciences in Warsaw. The main advantage of this method is a self limitation and sequential growth process, which enables using very reactive precursors and reducing growth temperature, while keeping good crystallographic and optical parameters. The polycrystalline and epitaxial ZnO films were deposited at 300°C on a Si and a GaN/Al₂O₃ template, respectively.

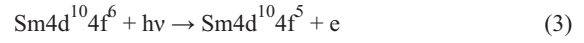
Deposition of Sm atoms onto the ZnO surface and photoemission measurements were performed at the FLIPPER II beamline in HASYLAB synchrotron radiation laboratory (Hamburg, Germany). Samarium was deposited from a Knudsen cell under ultra-high vacuum conditions at room temperature. Sm atoms were evaporated sequentially to obtain capping layers with the thickness of 1 ML, 3 ML and 7 ML. After the last deposition the samples were annealed for 0.5 and 4 hours at 300°C. The set of energy distribution curves (EDC) was acquired after each step of the deposition and annealing processes. The investigations of Sm/ZnO system by resonant photoemission spectroscopy were carried out for the photon energy range of 130-160 eV that corresponds to the $Sm4d \rightarrow Sm4f$ Fano resonance region [4]. For the $4f^6$ (Sm^{2+}) and the $4f^5$ (Sm^{3+}) configurations, two resonant photoemission processes occur:



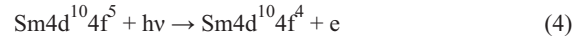
and



where $[]^*$ denotes an excited state. Each of the processes described above is accompanied by the classical photoemission process as follows:



and



As a result of the interference between resonant and classical photoemission channels, we observe two separated resonances for divalent (channels (1) and (3)) and trivalent (channels (2) and (4)) samarium states [5]. The photoemission resonance for Sm^{3+} configuration is observed at photon energy 141 eV, whereas the resonance for Sm^{2+} configuration occurs at photon energy 136 eV [4]. Photoemission Energy Distribution Curves (EDCs) taken after each step of deposition and annealing at photon energy of both Fano resonances are shown in Fig. 1 and 2.

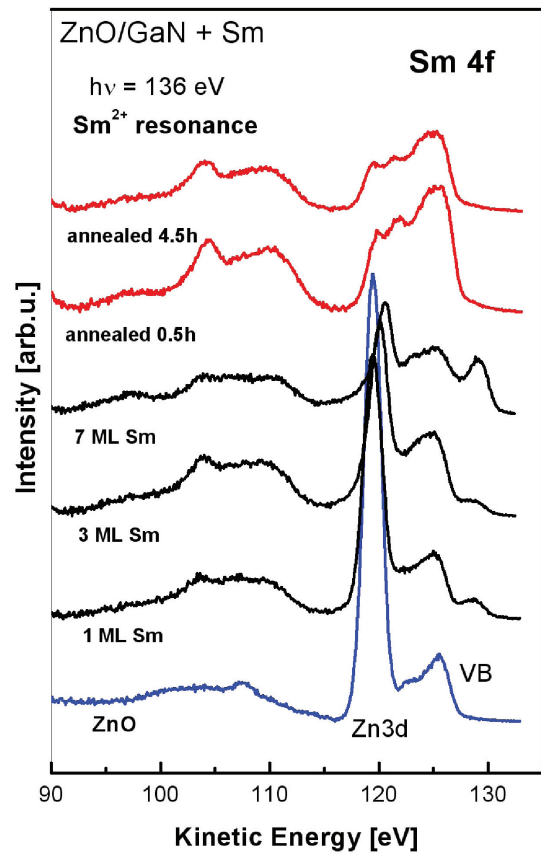


Fig. 1. Photoemission spectra EDCs for Sm/ZnO measured at $h\nu = 136$ eV to emphasize the $4f^6$ (Sm^{2+}) emission. The spectra show the valence band and the nearest core levels.

After each step of deposition we observed photoemission enhancement at the valence band edge, i.e. in the energy region characteristic of Sm^{2+} configuration. We also see a small increase of photoemission intensity in the energy region between 5 eV and 10 eV below the valence band edge, i.e. characteristic of Sm^{3+} configuration. After 30 min. annealing at 300°C the peak at the valence band edge (characteristic of Sm^{2+}) disappears and the feature of Sm^{3+} markedly increases, which is the fingerprint that samarium atoms become

trivalent. We also observe that the maximum of the Zn3d core level shifts to lower binding energy after samarium deposition, but returns to the previous position characteristic of ZnO crystal after 30 min. annealing. This indicates that chemical reaction between ZnO and Sm takes place at the interface region.

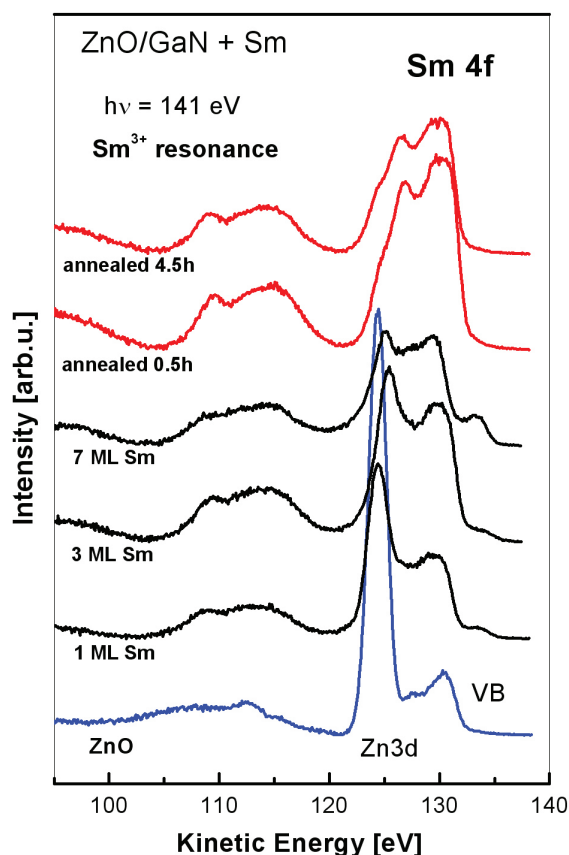


Fig. 2. Photoemission spectra EDCs for Sm/ZnO measured at $h\nu = 141$ eV to emphasize the $4f^5$ (Sm^{3+}) emission. The spectra show the valence band and the nearest core levels.

Acknowledgements: The authors acknowledge support by MSHE of Poland research Projects DESY/68/2007 and by the European Community via the Research Infrastructure Action under the FP6 Structuring the European Research Area" Programme (through the Integrated Infrastructure Initiative "Integrating Activity on Synchrotron and Free Electron Laser Science") at DESY. Partially supported by Innovative Economy (POIG.01.01.02-00-008/08).

References

- [1] W. M. Jadwisieniczak et al., J. Electron. Mater. 31, 776 (2002)
- [2] L. Armelao et al., J. Phys. Chem. C 111, 10194 (2007)
- [3] C.T.M. Ribeiro, F. Alvarez, A.R. Zanatta, Adv. Mat. 14, 1154 (2002)
- [4] E. Guziewicz et al., Surf. Sci. 551, 132 (2004)
- [5] F. Gerken, et al., in: B. Craseman (Ed.), Proceedings of the International Conference on X-ray and Atomic Inner-Shell Physics, AIP Conference Proceedings no. 94, AIP, New York, 1982, p. 602.

Structural transformations of GaMnAs layer annealed under enhanced hydrostatic pressure

Jadwiga Bak-Misiuk¹, Przemysław Romanowski¹, Elżbieta Dynowska¹, Andrzej Misiuk², Janusz Sadowski¹, Wolfgang Caliebe³

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Institute of Electron Technology (ITE), al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **3.** Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB (HASYLAB), Notkestrasse 85, Hamburg D-22603, Germany

e-mail: romeck@ifpan.edu.pl

Granular GaAs:(Mn,Ga)As structures are currently thoroughly investigated, because such material exhibits a ferromagnetic/superparamagnetic behavior at room temperature depending on cluster size (see e.g. [1]). Specific ferromagnetic precipitates are fairly easily produced in effect of annealing of III–V semiconductors at 400–700°C, yielding the multi-phase materials. The formation of nanoclusters and strains created in the GaAs:(Mn,Ga)As layers correlate with their structure and ferromagnetism existing up to room temperature. Depending on annealing temperature of GaMnAs, small cubic, of the zinc-blende type (ZB), or larger, of the NiAs-type, MnAs nanoclusters are formed [2].

The goal of present work is determination of the influence of annealing under enhanced hydrostatic pressure (HP) on strain state of the GaMnAs/GaAs heteroepitaxial system exhibiting, due to different Mn concentrations in the GaMnAs layer, also the different initial strain state. Ga_{1-x}Mn_xAs layers with nominal Mn contents $x = 0.025, 0.03, 0.04, 0.05$ or 0.063 were grown by MBE on the (001)-oriented GaAs substrates at 230°C. Nominal thickness of the layers was 0.8 nm.

After deposition each sample was cut into three pieces. One of them was left untreated, the others were reintroduced into the MBE growth chamber and annealed under As₂ flux or under HP = 1.1 GPa in argon atmosphere for 30 min. at $T = 500^\circ\text{C}$. X-ray diffraction measurements were performed using a synchrotron radiation as well as a standard laboratory source of Cu K α_1 radiation.

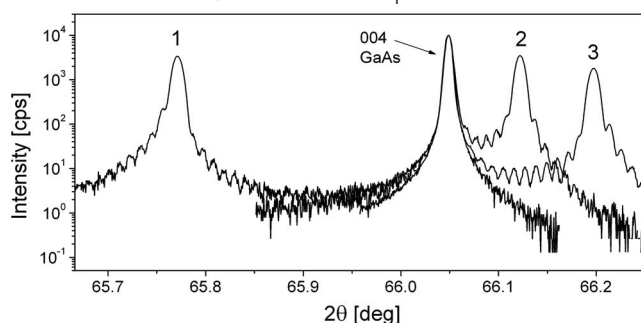


Figure 1. $2\theta/\omega$ scans of 004 reflection for Ga_{0.96}Mn_{0.04}As: 1 – as-grown, 2 – annealed at 500°C under 10^5 Pa, 3 – processed at 500°C under 1.1 GPa are compared with the (004) substrate reflection.

Enhanced hydrostatic pressure applied during annealing of the MBE grown GaMnAs layers at 500°C results in increasingly strained layers (Fig. 1). This HP-induced strain is definitely dependent also on

the layer composition. The creation of additional strain within nano-clusters under the *HP-T* conditions results in the increasingly strained granular layer state.

References:

- [1] A. Kwiatkowski, D. Wasik, M. Kaminska, R. Bozek, J. Szczytko, A. Twardowski, J. Borysiuk, J. Sadowski, J. Gosk, *J. Appl. Phys.* **101** (2007) 113912.
- [2] K. Lawniczak-Jablonska, J. Bak-Misiuk, E. Dynowska, P. Romanowski, J.Z. Domagala, J. Libera, A. Wolska, M.T. Klepka, P. Dłuzewski, J. Sadowski, A. Barcz, D. Wasik, A. Twardowski, A. Kwiatkowski, *J. Solid State Chem.* (2011) in press.

15:15

Poster

23

Low-temperature expansion of metastable $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ solid solution

Roman Minikayev¹, Elzbieta Dynowska¹, Tomasz Story¹, Andrzej Szczerbakow¹, Anthony Bell², Dmytro M. Trots³, Wojciech Szuszkiewicz¹

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** HASYLAB at DESY, Notkestr., Hamburg 22607, Germany **3.** Universität Bayreuth, Universitätsstr. 30, Bayreuth 95440, Germany

e-mail: szusz@ifpan.edu.pl

The PbTe-rich PbTe-CdTe system, containing a lot of CdTe precipitates, may be considered as a composite matrix perfectly matching principal properties required for future thermoelectric applications. However, it is difficult to obtain a uniform material of this kind. So far, in the case of bulk crystals grown by the Bridgman technique or by rapid quenching and annealing method only polycrystalline samples were obtained for the CdTe molar fraction $x > 0.03$. For quenched $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ solid solutions, the limited information about the phase diagram and on the solubility limit of CdTe in PbTe were obtained long time ago [1-4]. On the basis of these data the thermodynamic behaviour of the Cd-Pb-Te system was also recently analyzed [5].

The successful growth of single bulk $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ crystals (with $x \leq 0.11$) at the Institute of Physics of the Polish Academy of Sciences in Warsaw opened new research opportunities, as was reported earlier [6, 7]. These crystals were grown by self-selecting vapor transport method [8]. In particular, an access to new materials of high-quality made it possible to investigate the relevant part of the phase diagram in detail. The results of above mentioned investigations demonstrated the necessity of important modifications of this diagram. The selected results have been shown in recent publications [7, 9] and confirmed in part by independent studies [10, 11].

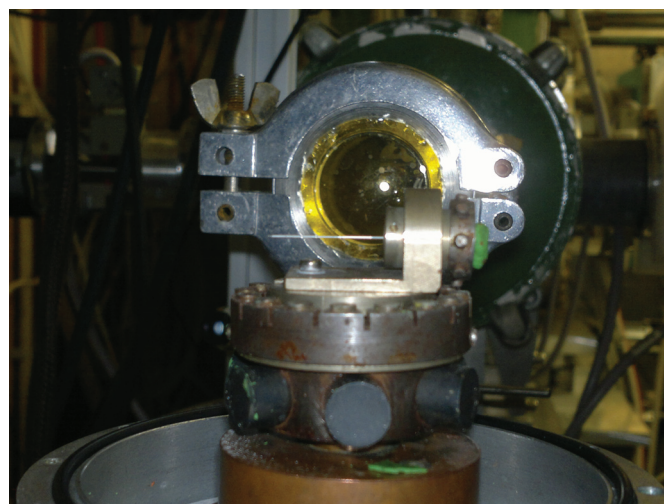


Figure 1. The capillary inside the cryostat prepared for low-temperature X-ray diffraction measurements (the upper part of the cryostat was removed).

In this work we would like to report the preliminary results of X-ray powder diffraction studies performed on a set of $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ solid solutions at low temperatures ($15\text{K} \leq T \leq 300\text{K}$). In-situ low temperature X-ray diffraction measurements were performed at the B2 (HASYLAB/DESY), using the Debye-Scherrer geometry. For that purpose the samples were prepared as a mixture of powdered $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ crystals and fine diamond powder, and placed in a thin-wall quartz capillary. During the measurements the capillary rotates inside the cryostat (Fig. 1). The analysis of the results accomplished with the Rietveld refinement (an example of the fit is shown in Fig. 2) demonstrated a monotonous evolution of the lattice parameter with temperature (see Fig. 3). The expansion of investigated samples at studied temperature region and the compatibility of obtained results with previously reported data for CdTe [12,13] and PbTe [14, 15] will be shown and discussed.

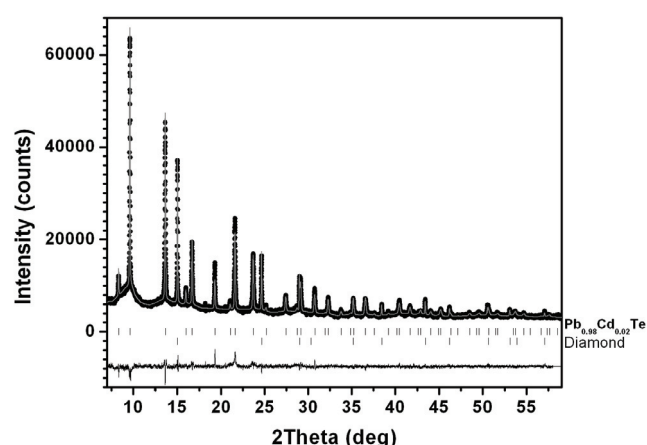


Figure 2. Rietveld refinement for $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.02$). The observed data are indicated by dots and the calculated ones by the solid line. The short vertical lines mark the positions of Bragg reflections, whereas the lower curve shows the difference between the observed and calculated powder diffraction patterns.

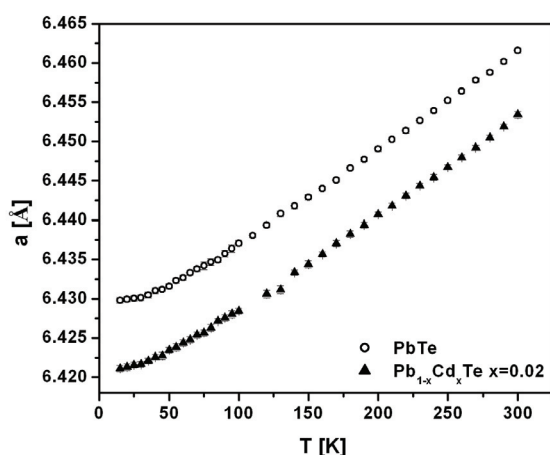


Figure 3. Temperature dependencies of lattice-parameters of PbTe (○) and $\text{Pb}_{0.98}\text{Cd}_{0.02}\text{Te}$ (▲) in the low-temperature range.

The research leading to these results has been partially supported by the European Community's Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) under grant agreement no. 226716, by the European Union within the European Regional Development Fund, through grant Innovative Economy (POIG.01.01.02-00-108/09), and by the Ministry of Science and Higher Education (Poland) grant DESY/68/2007.

References:

- [1] A.J. Rosenberg, R. Gierson, J.C. Woolley, and P.M. Nikolic, *Trans. A.I.M.E.* **230**, 342 (1964).
- [2] P.M. Nikolic, *Brit. J. Appl. Phys.* **17**, 341 (1966).
- [3] A.J. Crocker, *J. Mater. Sci.* **3**, 534 (1968).
- [4] V. Leute and R. Schmidt, *Z. Phys. Chem.* **172**, 81 (1991).
- [5] Y. Liu, L. Zhang, and D. Yu, *J. Electron. Mater.* **38**, 2033 (2009).
- [6] M. Szot, A. Szczerbakow, K. Dybko, L. Kowalczyk, E. Smajek, V. Domukhovski, E. Łusakowska, P. Dziawa, A. Mycielski, T. Story, M. Bułafa, M. Galicka, P. Sankowski, R. Buczko, and P. Kacman, *Acta Phys. Pol.* **A116**, 959 (2009).
- [7] R. Minikayev, E. Dynowska, P. Dziawa, E. Kamińska, A. Szczerbakow, D. Trots, and W. Szuszkiewicz, *Synchr. Rad. Nat. Sci.* **8**, 83 (2009).
- [8] A. Szczerbakow and K. Durose, *Prog. Cryst. Growth Character. Mater.* **51**, 81 (2005).
- [9] R. Minikayev, E. Dynowska, E. Kamińska, A. Szczerbakow, D. Trots, T. Story, and W. Szuszkiewicz, *Acta Phys. Pol.* **A119**, 699 (2011).
- [10] M.K. Sharon, *Zh. Neorgan. Khim.* **55**, 1190 (2010) (in Russian); *J. Inorg. Chem.* **55**, 1119 (2010).
- [11] K. Ahn, M.-K. Han, J. He, J. Androulakis, S. Ballikaza, C. Uher, V.P. Dravid, and M.G. Kanatzidis, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 5227 (2010).
- [12] S.I. Novikova, *Fiz. Tverd. Tela* **2**, 2341 (1960) (in Russian); *Sov. Phys. Solid State* **2**, 2087 (1961).
- [13] T.F. Smith and G.K. White, *J. Phys. C* **8**, 2031 (1975).

[14] S.I. Novikova and N.Kh. Abrikosov, *Fiz. Tverd. Tela* **5**, 1913 (1963) (in Russian); *Sov. Phys. Solid State* **5**, 1397 (1964).

[15] B. Houston, R.E. Strakna, and H.S. Belson, *J. Appl. Phys.* **39**, 3913 (1968).

15:15	Poster	24
-------	--------	----

Proste wyjaśnienie mechanizmu powstawania promieniowania synchrotronowego

Kazimierz Turzyniecki

Kolegium KSW, Warszawa 02-946, Poland

e-mail: katur@message.pl

Wiemy jak budować synchrotrony. Wiemy jak wytwarzać promieniowanie synchrotronowe. Prawie wszystko wiemy o samym promieniowaniu synchrotronowym i jego fascynujących właściwościach. Ciągłe jednak nie znamy dobrze wszystkich uwarunkowań jego powstawania.

W pracy zostanie zaprezentowane proste wyjaśnienie mechanizmu powstawania promieniowania synchrotronowego oparte tylko na zasadzie zachowania energii-pędu promieniującego elektronu poruszającego się w zakrzywiającym jego toru polu magnetycznym.

Przy tej sposobności zostanie wyjaśnione dlaczego proces wytwarzania promieniowania nie ma nic wspólnego z teorią relatywistyczną Einsteina i dlaczego do opisu własności promieniowania synchrotronowego nie można stosować transformacji Lorentza.

15:15	Poster	25
-------	--------	----

Investigation of strain and lattice parameters distribution in epitaxial laterally overgrown InGaN/GaN structures

Aleksandra Wierzbicka¹, Jarosław Domagała¹, Marcin Sarzynski², Daniel Luebbert³, Zbigniew R. Zytewicz¹

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **2.** Polish Academy of Sciences, Institute of High Pressure Physics (UNIPRESS), Sokolowska 29/37, Warszawa 01-142, Poland **3.** Humboldt-Universität, Newtonstr. 15, Berlin 12489, Germany

e-mail: czyzak@ifpan.edu.pl

GaN and its ternary alloys with In and Al (InGaN, AlGaIn) are wide and direct band gap semiconductor materials used for fabrication of optoelectronic devices such as light emitting diodes and laser diodes. However, due to limited availability of suitable bulk substrates many types of device structures are still grown on foreign substrates. As a result, high dislocation density in planar epitaxial layers (10^8 - 10^9 /cm²) strongly limits the efficiency of radiative recombination processes. One way to overcome this issue is when the planar architecture of the layer is gradually replaced by more sophisticated 3 dimensional structures in order to efficiently decrease the dislocation density in lattice mismatched epitaxial layers. In particular, remarkable results are achieved by application of the Epitaxial Lateral Overgrowth (ELO) approach. There are many reports showing that ELO is a powerful technique for reducing dislocation density by 3-4 orders of magnitude.

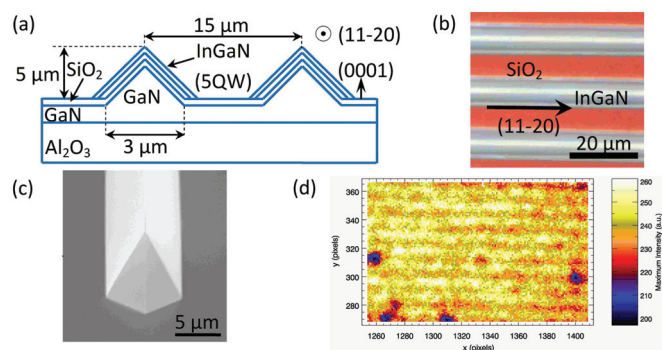


Fig. 1. Schematic cross-section (a) and plane view (b) of InGaN/GaN ELO layer on sapphire substrate covered by GaN buffer and by SiO_2 mask. Stripes are parallel to (11-20) direction. Panel (c) presents SEM image of the single ELO stripe. Part (d) shows experimental results of spatial distribution of local diffraction intensity in the sample measured with the diffraction plane parallel to the seeding lines. Pixel size is 1.4 μm .

The aim of this work was to investigate with synchrotron, using spatially resolved Rocking Curve Imaging (RCI) technique, distribution of strain and lattice parameters in specially designed ELO structures [1]. The samples studied are composed as follows: first the epitaxial GaN layer on sapphire substrate was covered by a thin SiO_2 mask. Next the 3 μm wide seeding windows spaced by 15 μm were opened in the mask. The growth of the GaN ELO layers by metal-organic chemical-vapor deposition (MOCVD) started in mask free seeding areas of the GaN/sapphire template. Finally the five InGaN quantum wells with GaN barriers were grown on GaN stripes (Fig. 1a-c). Figures 1(a) and (b) show schematic cross-section of two ELO stripes and plane view of the structure, respectively. The SEM image (Fig. 1c) shows a characteristic shape of the single ELO stripe.

Such sophisticated architecture of the sample is ideal to demonstrate the potential of RCI technique. As it was reported earlier [2] the RCI technique combines the features of X-ray imaging (very high spatial resolution) and X-ray diffractometry (very high angular resolution). In our experiment the monochromatic synchrotron X-ray beam illuminates the sample which is rotated in small steps around an axis perpendicular to the diffraction plane near its Bragg angle. The diffraction images are recorded for each angular position of the sample by using a CCD camera (2048×2048 pixels, 1.4 μm pixel size). The signal is analyzed with specialized software [1]. Experiments reported here were performed at the beamline ID19 in ESRF, Grenoble, France. Figure 1(d) presents the spatial distribution of local diffraction intensities in the sample. Signals originating from the GaN buffer and the ELO InGaN/GaN stripes are clearly distinguished. Even local mosaicity on the stripes is detected, which is due to high spatial resolution offered by RCI technique. The results of RCI analysis are compared with those obtained by laboratory technique of spatially resolved X-ray diffraction (SRXRD) [3]. Unfortunately, a small distance between seeding windows resulted in an overlap of signals originating from individual stripes, so it was very hard to investigate spatial distribution of sample parameters. Therefore, we found RCI technique irreplaceable to see differences between InGaN/GaN stripes and the rest of the sample.

Acknowledgments: This work was partially supported by the European Union within European Regional Development Fund, through grant Innovative Economy (POIG.01.01.02-00-008/08 NanoBiom) and by special project ESRF/MA/623/2009 from the Polish Ministry of Science and High Education.

References

- [1] D. Lübbert, T. Baumbach, P. Mikulik, P. Pernot, L. Helfen, R. Kohler, T. M. Katona, S. Keller, S. P. DenBaars, J. Phys. D: Appl. Phys. **38** (2005) A50.
- [2] A. Wierzbicka, D. Lübbert, J.Z. Domagala, Z.R. Zytkeiwicz, Acta Phys. Pol. A, **116** (2009) 976.
- [3] J.Z. Domagala, A. Czyzak, Z.R. Zytkeiwicz, Appl. Phys. Lett. **90** (2007) 241904.

15:15	Poster	26
-------	--------	----

Mangan w warstwach ZnMnO hodowanych metodą osadzania warstw atomowych

Anna Wolska, Marcin T. Klepka, Bartłomiej S. Witkowski, Małgorzata I. Łukasiewicz, Elżbieta Guziewicz, Marek Godlewski
 Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

e-mail: wolska@ifpan.edu.pl

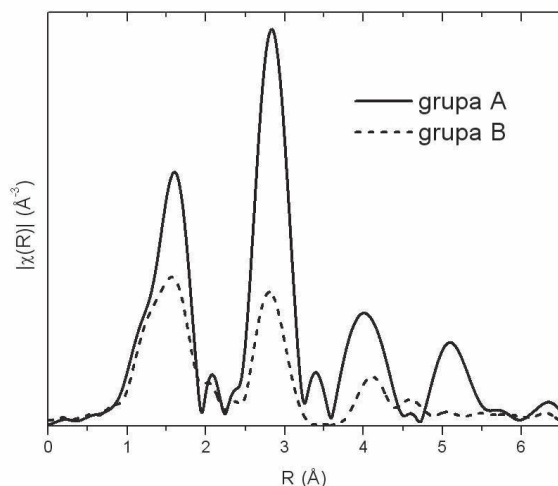
ZnMnO (obok ZnCoO) jest jednym z intensywnie badanych materiałów do zastosowań spintronicznych. Dla ZnMnO (próbek p-typu) przewidziano możliwość osiągnięcia ferromagnetyzmu w temperaturze pokojowej. Wyniki badań przeprowadzonych przez różne grupy dostarczyły bardzo rozbieżnych danych na ten temat. Wydaje się, że raportowane właściwości magnetyczne istotnie zależały od sposobu wykonania badanych próbek. W tej pracy dyskutujemy wyniki dla próbek wykonanych w procesie osadzania warstw atomowych (atomic layer deposition - ALD).

Warstwy ZnMnO zostały wykonane metodą ALD w temperaturze 160 °C. Metoda ta pozwoliła na uzyskanie warstw o wysokiej jednorodności rozkładu manganu. Zawartość Mn zmierzona została przy użyciu EDX i wynosiła od 0.3 % do 27 %. Lokalne otoczenie atomów manganu badane było przy pomocy rentgenowskiej spektroskopii absorpcyjnej (XANES i EXAFS). Jej postawową zaletą jest selektywność pierwiastkowa oraz duża czułość - badania można przeprowadzać nawet dla niewielkiej koncentracji danego pierwiastka.

Widma absorpcyjne na krawędzi K manganu zostały zmierzone w laboratorium Hasylab na stacji A1. Z uwagi na niewielkie zawartości badanego pierwiastka pomiary wykonano przy użyciu detektora fluorescencyjnego. Pomiary przeprowadzono w kriostacie azotowym w temperaturze ciekłego azotu. Widma tlenków manganu zmierzone zostały metodą transmisyjną.

Zarówno widma XANES, jak i EXAFS prezentowanych próbek grupują się w zależności od koncentracji Mn w objętości warstwy wyznaczonej w następujący sposób: (zawartość procentowa Mn zmierzona przy pomocy EDX) *100 / (grubość warstwy). Można podzielić je na trzy grupy: A - mała koncentracja Mn (0.06 - 1.55); B - średnia koncentracja Mn (12.5 - 16.7); C - wysoka koncentracja Mn (67.5).

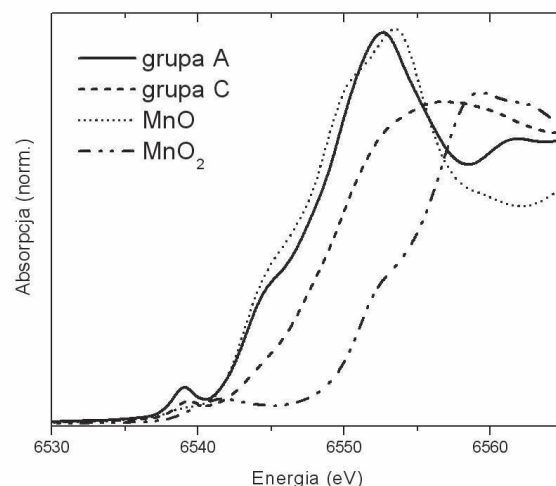
Analiza wykazała, że dla warstw o niskiej zawartości Mn w jednostce objętości (grupa A), wszystkie atomy manganu podstawiają się w pozycje Zn w strukturze ZnO. Najbliższe otoczenie lokalne wbudowanych atomów manganu składa się z czterech atomów tlenu w odległości 2.04 Å. Różni się więc ono od oryginalnego otoczenia atomów Zn, gdzie jeden z atomów tlenu znajduje się w odległości 1.97 Å, a trzy pozostałe w odległości 2.04 Å.



Rysunek 1. Transformata Fouriera widm EXAFS dla przykładowych próbek z grupy A i B.

W przypadku grupy A zaburzenia wprowadzane przez atomy manganu nie powodują wyraźnych modyfikacji struktury. Rysunek 1 przedstawia transformatę Fouriera przykładowych oscylacji widma EXAFS. Można na nim zaobserwować wyraźne maksima odpowiadające kolejnym czterem strefom koordynacyjnym. Znacząco, że jakość strukturalna badanej warstwy jest bardzo wysoka. Porównując to z przykładowym widmem z grupy B, można stwierdzić, że dla tej grupy maksima są dużo niższe i wręcz nie można wyróżnić czwartej strefy koordynacyjnej. Dopasowania wykonane dla próbek z grupy B pokazują, że wciąż wszystkie atomy manganu wbudowują się w strukturę ZnO, jednakże parametr określający nieporządek strukturalny jest tu wyraźnie wyższy niż dla grupy A. Wynika stąd, że zaburzenia struktury wprowadzane przez atomy manganu nie są już zanedbywalne i znacząco pogarsza się jakość warstwy,

W przypadku próbki z grupy C już położenie krawędzi zmienia się znacząco. W porównaniu z grupami A i B przesuwają się one o ok. 2 eV w stronę wyższych energii co wyraźnie widać na Rys. 2. Analiza wykazała, że związane jest to z obecnością wydzieleni tlenku manganu. Dopasowania widm EXAFS potwierdzają, że ok. 50% atomów Mn wbudowuje się w strukturę ZnO, zaś reszta tworzy MnO_2 .



Rysunek 2. Położenie krawędzi absorpcji przykładowych widm z grupy A i C w porównaniu z tlenkami manganu.

Z przeprowadzonej analizy widm absorpcyjnych wynika, że w warstwach ZnMnO wyhodowanych metodą ALD, atomy manganu wbudowują się równomiernie w strukturę ZnO, aż do granicy rozpuszczalności. Powyżej tej granicy powstają wydzielania tlenków manganu.

Podziękowania: Autorzy wyrażają podziękowanie za finansowanie Unii Europejskiej z projektu *European Regional Development Fund* w ramach grantu *Innovative Economy* (POIG.01.01.02-00-008/08) a także z 7-mego projektu ramowego - projekt ELISA (FP7/2007-2013), numer kontraktu 226716.

15:15

Poster

27

Atomic structure of Cu-Zr metallic glass assessed by EXAFS method and molecular dynamics simulations

Jerzy Antonowicz¹, Anna Pietnoczka¹, Tomasz Drobiazg¹, George A. Almyras², Dimitris G. Papageorgiou³, Giorgos A. Evangelakis²

1. Warsaw University of Technology, Faculty of Physics, Koszykowa 75, Warszawa 00-662, Poland **2.** University of Ioannina, Department of Physics, P.O. Box 1186, Ioannina 45110, Greece **3.** University of Ioannina, Department of Materials Science and Engineering, Ioannina GR-45110, Greece

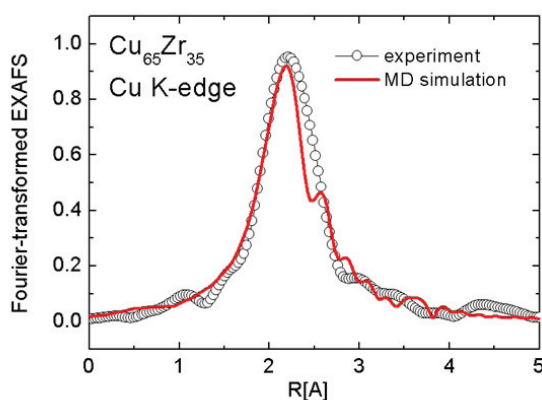
e-mail: antonowi@if.pw.edu.pl

We report on atomic structure study of $\text{Cu}_{65}\text{Zr}_{35}$ amorphous alloy (metallic glass) by means of extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) method and molecular dynamics (MD) simulations. The limitations and applicability of EXAFS technique exploited for resolving the local structure of metallic glasses are discussed. In order to verify the reliability of EXAFS analysis method we use two kinds of approach: *ab-initio* EXAFS signal simulation from equilibrium MD configuration and standard experimental EXAFS signal fitting. Copper K-edge EXAFS spectra of melt-spun glassy ribbons were measured in transmission mode at liquid nitrogen temperature to reduce thermal disorder. The MD simulations for system of

128.000 atoms were based on a tight binding in the second moment approximation model adopted for Cu-Zr glasses. Direct modeling of EXAFS spectra from MD configuration was performed using FEFF8 code [1]. We demonstrate how the variety of local atomic icosahedral-like environments contribute to the global EXAFS signal. The final spectra were obtained by averaging the EXAFS oscillations originating from individual absorbing atoms. It was found that due to atomic disorder the averaging over at least 1000 atoms is required for satisfactory results. The averaged EXAFS spectra are in very good agreement with the experimental ones indicating that MD reproduces the true atomic structure of the amorphous alloy. Independently we apply a different approach based on fitting of experimental EXAFS data using VIPER software [2]. The fitting parameters were: coordination number, interatomic distances and mean square atomic displacement. The resulting values were compared with those derived from the MD configuration. In all cases the fitted values were consistent with the MD data indicating high reliability of the EXAFS fitting approach [3].

References:

- [1] A. Ankudinov, B. Ravel, J.J. Rehr, and S. Conradson, Phys. Rev. B **58**, 7565 (1998)
- [2] K. V. Klementiev, *VIPER for Windows*, freeware; K.V. Klementiev, J. Phys. D: Appl. Phys. **34**, 209-17 (2001)
- [3] J. Antonowicz, A. Pietnoczka, W. Zalewski, R. Bacewicz, M. Stoica, K. Georgarakis, A.R. Yavari, J. Alloys Compd. **509S**, S34 (2011)



15:15

Poster

28

Stany Mn 3d w paśmie walencyjnym $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$ Bogdan J. Kowalski¹, Robert Nietubyc², Janusz Sadowski^{1,3}

1. Instytut Fizyki PAN, Al. Lotników 32/46, Warszawa 02668, Poland **2.** Instytut Problemów Jądrowych im. Andrzeja Sołtana, Otwock-Świerk 05-400, Poland **3.** Lund University, MAX-lab, Lund SE-221 00, Sweden

e-mail: kowab@ifpan.edu.pl

Wkład stanów Mn 3d do pasma walencyjnego $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$, ważny czynnik determinujący, właściwości tego półprzewodnika, został określony za pomocą spektroskopii fotoemisyjnej. Badania metodą rezonansowej spektroskopii fotoemisyjnej, prowadzone w zakresie energii fotonów odpowiadającym wzbudzeniu Mn 3p-3d, pozwoliły

zidentyfikować struktury widm odpowiadające emisji ze stanów Mn 3d. Zbadanie przebiegu pasma walencyjnego wzdłuż kierunku [100] zostało dokonane za pomocą kątowno-rozdzielczej spektroskopii fotoemisyjnej. Uzyskane wyniki wykazały, że bezdyspersyjna struktura obserwowana przy energii wiązania 3.8 eV (względem energii Fermiego) jest związana ze stanami Mn 3d.

$\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$ jest rozcieńczonym półprzewodnikiem magnetycznym z grupy III-V wykazującym własności ferromagnetyczne, jednakże we względnie niskich temperaturach ($T_C \approx 25$ K [1]). Zapewne z tego względu był on badany znacznie mniej intensywnie niż $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, jednak skupia na sobie uwagę ze względu na możliwość zbadania w nim oddziaływania jonów magnetycznych z anionami chemicznie odmiennymi od arsenowych a także ze względu na strukturę pasmową przydatną w konstrukcji nowych urządzeń elektronicznych, takich jak ferromagnetyczna rezonansowa dioda tunelowa [2].

Eksperymenty fotoemisyjne były wykonywane za pomocą spektrometru fotoemisyjnego na linii 41 laboratorium synchrotronowego MAX-lab Uniwersytetu w Lund w Szwecji. Widma fotoemisyjne były zbierane w warunkach emisji normalnej dla energii fotonów z zakresu 30-51 eV (w celu obserwowania rezonansu Mn 3p-3d) oraz z zakresu 50-106 eV (w celu zbadania dyspersji pasm wzdłuż kierunku [100]).

Badane próbki $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$ przygotowywano metodą epitaksji z wiązek molekularnych w układzie bezpośrednio połączonym ze spektrometrem fotoemisyjnym. Były więc przenoszone do spektrometru w ultra wysokiej próżni, co zapobiegało adsorpcji zanieczyszczeń na powierzchni warstw i konieczności ich oczyszczania inwazyjnymi metodami wprowadzającymi ryzyko zaburzenia ich struktury i składu chemicznego. Warstwy epitaksjalne $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$ o zawartości manganu od 1 do 3% hodowano na podłożach GaSb(100) we względnie niskiej temperaturze około 230 °C. Wzrost metodą MBE był monitorowany za pomocą odbiciowej dyfrakcji wysokoenergetycznych elektronów (RHEED). Obrazy dyfrakcyjne odpowiadające dwuwymiarowemu wzrostowi (prążki) oraz wyraźne oscylacje reflektancji zwierciadlanego RHEED obserwowano w ciągu całego procesu wzrostu, aż do osiągnięcia ich końcowej grubości (od 50 do 300 Å). Nie zaobserwowano także w obrazach RHEED żadnych przejawów tworzenia się wytrąceń obcej fazy (na przykład segregacji nanokryształów MnSb [3]). Powierzchnie (100) warstw $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$ wykazywały obrazy dyfrakcji niskoenergetycznych elektronów (LEED) charakterystyczne dla asymetrycznej rekonstrukcji (1x3). Nieobecność wytrąceń MnSb w badanych próbkach została potwierdzona także przez badania porównawcze (z próbkami zawierającymi wytrącenia) przeprowadzone metodą skaningowej mikroskopii elektronowej.

Przeprowadzone badania otrzymały wsparcie finansowe w ramach projektu "European Community's Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) grant agreement no. 226716".

Referencje:

- [1] F. Matsukura, E. Abe, H. Ohno, J. Appl. Phys. **87**, 6442 (2000)
- [2] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, Appl. Phys. Lett. **82**, 2296 (2003)
- [3] K. Lawniczak-Jablonska, A. Wolska, M.T. Klepka, S. Kret, J. Gosk, A. Twardowski, D. Wasik, A. Kwiatkowski, B. Kurowska, B.J. Kowalski, J. Sadowski, J. Appl. Phys. **109**, 074308 (2011)

15:15 Poster 29

Characterization of the defect structure in gadolinium orthovanadate single crystals grown by the Czochralski method

Edyta Wierzbicka¹, Agnieszka Malinowska¹, Krzysztof Wieteska², Wojciech Wierzchowski¹, Maria Lefeld-Sosnowska³, Marek A. Swirkowicz¹, Tadeusz Łukasiewicz¹, Carsten Paulmann⁴

1. Institute of Electronic Materials Technology (ITME), Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland **2.** Institute of Atomic Energy POLATOM, Świerk 05-400, Poland **3.** Warsaw University, Institute of Experimental Physics (IEP UW), Hoża 69, Warszawa 00-681, Poland **4.** University of Hamburg, Mineralogisch-Peritographisches Institut, Hamburg, Germany

e-mail: eolsz@fuw.edu.pl

Gadolinium orthovanadate (GdVO_4) belongs to the group of rare earth orthovanadates (ReVO_4), containing promising optical materials for laser and polarizer applications. These compounds may host some important ions responsible for laser phenomena. In particular the gadolinium orthovanadate is interesting as the material for diode-pumped solid-state lasers. Our former investigation of YVO_4 crystal, which belongs to the same group, were published elsewhere [1-2].

The lattice crystal structure of GdVO_4 single crystals undoped and doped with erbium or thulium was studied by means of X-ray diffraction topographic methods, exploring laboratory and synchrotron radiation sources. The synchrotron radiation experiments were carried out at the station F1 (white beam) at HASYLAB (DESY, Hamburg) in back reflection geometry. Conventional projection X-ray topographs were recorded in back reflection and in transmission geometry using $\text{MoK}_{\alpha 1}$ radiation.

The dominating imperfection of the investigated crystals was a variously developed block structure. It is generally caused by thermal stresses, but the development of this structure can also be moderated by some kinds of doping. The evaluation of lattice misorientation was performed by means of superimposed projection and section white beam synchrotron radiation topographs. In a case of extended block structure a series of Lang topographs with slightly angular settings was recorded. The evaluated misorientation between various blocks was in the range of several arc minutes.

The results revealed some changes between the samples cut out from different regions of the crystal. It was observed that the block structure is much more developed in samples cut out of the end part of the crystals. Some differences between differently doped crystals were also apparent. In particular the best perfection was observed in the crystal doped with thulium (4 at. %), where the mosaic structure was practically absent.

Acknowledgements

The synchrotron investigations were supported by the HASYLAB project II-20060165 EC.

References

[1] K. Wieteska, W. Wierzchowski, E. Wierzbicka, A. Malinowska, M. Lefeld-Sosnowska, T. Łukasiewicz, W. Graeff, *Acta Physica*

Polonica A 114 (2008), 455-461;

[2] A. Malinowska, E. Wierzbicka, M. Lefeld-Sosnowska, K. Wieteska, W. Wierzchowski, T. Łukasiewicz, M. Świrkowicz and W. Graeff, *Acta Physica Polonica A* 117 (2010), 328-331.

15:15 Poster 30

The Rossendorf beamline BM20 at the ESRF: Overview and perspectives

Artem Shalimov^{1,2}, Carsten Baetz^{1,2}, Joerg Grenzer², Johannes V. Borany²

1. ROBL-CRG at the ESRF, B.P. 220, Grenoble F-38043, France

2. Institute of Ion Beam Physics and Materials Research, Helmholtz Zentrum Dresden Rossendorf (HZDR), Bautzner Landstrasse 400, Dresden 01328, Germany

e-mail: shalim@ifpan.edu.pl

The Rossendorf beamline (ROBL) BM20 at the European Synchrotron Radiation Facility in Grenoble is operated by Helmholtz Zentrum Dresden Rossendorf since 1999. ROBL belongs to Collaborative Research Group (CRG) of beamlines and provides two third parts of beamtime for users from HZDR, while the one third of beamtime is offered to external users selected by ESRF advisory committee. Two experimental stations are placed at the beamline: one is dedicated to materials research, while the second station is designed for spectroscopic investigations of actinides and other radionuclides. Material Research Hutch (MRH) is equipped with high precision heavy duty 6-circle diffractometer used for structural characterization of thin layers, nanoparticles, interfaces and analysis of other structural properties of solid state materials. Experimental installations allow users to perform different types of complex experiments including *in-situ* deposition, annealing in vacuum or gas environment, spectroscopic measurements, following (electro) chemical reactions or morphology transformations using available fast detectors and supplementary devices. Radiochemistry Hutch (RCH) possesses highly specialized safety system making possible investigations of alpha-emitting radionuclides by x-ray absorption spectroscopy (XAS) methods. (More information at www.hzdr.de).

Extensive upgrade of beamline optics, which assets in gain of beam brilliance, homogeneity and accessible energy range is scheduled in 2011. According to our calculation, new monochromator combined with toroidal x-ray mirrors will increase beam intensity up to 3 orders of magnitude in respect to the present value. Energy tunable in the range from 6 up to 35 keV allows users to realize element sensitive spectroscopic measurements like XANES and EXAFS, as well as x-ray scattering investigations (XRD, XRR, GID or GISAXS) in anomalous mode. MRH detector installations include novel 1D position sensitive and 2D image Dectris detectors, two modern energy dispersive detectors from KETEK and Bruker Axes, as well as traditional scintillator counters. Besides of that, experimental setup can be tailored with equipment loaned from ESRF instrument pool.

Summarizing the overview of Rossendorf beamline, we would admit broad spectrum of research feasible at ROBL stations: all possible diffraction measurements combined with spectroscopic analysis can be performed during *in-situ* experiments involving film deposition, different types of annealing, chemical reactions etc. Upcoming modernization of x-ray optics will significantly improve brilliance of the

beam, giving outstanding possibilities for researchers in their most challenging experiments.

15:15	Poster	31
-------	--------	----

Studies of the structure and morphology of gold nanoparticles in solution by TEM, SAXS and UV-vis

Magdalena Murawska, Maciej Kozak

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Fizyki, Zakład Fizyki Makromolekularnej (UAM), Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland

e-mail: madziamur@gmail.com

Gold nanoparticles have a great number of applications in medicine, such as the specific drugs delivery systems or more accurate and less expensive diagnostic and genetic tests.

The aim of this study was a characterization of the structure of gold nanoparticles in solution. The synthesis of nanoparticles was performed by Turkevich method, by reducing tetrachloroauric acid in the presence of trisodium citrate, and also using this method with the addition of dimeric surfactants (chloride and propionate 1,1'-(1,4-butan)bis3-dodecyloxymethylimidazolium and other).

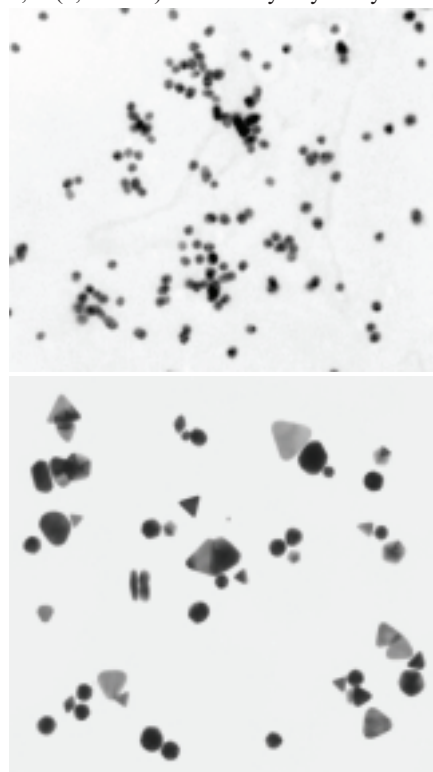


Figure 1 An example of TEM image of gold nanoparticles obtained without the addition of surfactant (top) and in the presence of surfactant GC12P (bottom).

The morphology and size distribution of the obtained gold nanoparticles were examined using electron microscopy TEM and small angle X-ray scattering of synchrotron radiation (data collection on BLI9-11-4, MAX-lab, Lund, Sweden $\lambda=0.091$ nm). For the obtained nanoparticles solution we have observed plasmon resonance corresponding to the presence of gold nanoparticles with sizes ranging from 5-100 nm. TEM images confirmed the spherical shape of nano-

particles obtained in aqueous solutions of sodium citrate HAuCl_4 and show the presence of gold nanoparticles with tetrahedric morphology in solutions with added surfactant (Fig.1).

The present study was carried out with financial support from the Ministry of Science and Higher Education (grant number N N202 127237).

15:15	Poster	32
-------	--------	----

Small angle X-ray scattering studies of Sgt1 protein from *Hordeum vulgare*

Michał Taube¹, Joanna Pieńkowska², Artur Jarmołowski³, Maciej Kozak¹

1. Department of Macromolecular Physics, Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University, Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland 2. Department of Cell Biology, Institute of Experimental Biology, Faculty of Biology A. Mickiewicz University, Umultowska 89, Poznań 61-614, Poland 3. Department of Gene Expression, Institute of Molecular Biology and Biotechnology, Faculty of Biology, A. Mickiewicz University, Umultowska 89, Poznań 61-614, Poland

e-mail: mtaube@amu.edu.pl

Sgt1 is a 41kDa protein conserved in eukaryotes, which is involved in many important cellular processes [1]. First it was found in yeast as a component of centromere assembly and suppressor of *skp1-4* mutation in SCF ubiquitin ligase subunit gene. Sgt1 protein, both in human and plants, is able to interact with Heat shock protein 90kDa (Hsp90) a important molecular chaperone, that take part in activation and proper folding of receptors, kinases and transcription factors. In addition, in plants Sgt1 is involved in disease resistance response and mutation in its gene can cause loss of resistance and plant death in case of pathogen infection. Sgt1 protein interacts with SCF ubiquitin ligase complex and with COP9 signalosome complex, both playing key role in protein degradation through 26S proteasome machinery.

Sgt1 consist of three distinct domains, none of which poses enzymatic activity. N-terminal - tetratricopeptide repeat domain (TPR) is known to interact with other TPR containing protein SRFR1 in *Arabidopsis*, but not with Hsp90, what is unusual because this domain is recognized in Hsp90 co-chaperones. Middle Sgt1 and chord specific domain (CS) interacts with N-terminal domain of Hsp90 and also with Rar1 protein in plants. This domain is structurally related to another Hsp90 co-chaperone p23. C-terminal domain named Sgt1 specific domain (SGS), known to be intrinsically disordered, also interacts with leucine rich repeat domain protein such as barley Mla1 and yeast *cdc35p*. In addition SGS interacts with EF-hand S100 proteins. Between domains are located two variable regions (VR1 and VR2) with no specific function known [2].

Sgt1 TPR domain in solution of low ionic strength can form a dimers. In this study we tested the dimer/monomer equilibrium using small angle scattering of synchrotron radiation and *ab-initio* low-resolution modeling. Using multivariate curve resolution last square method (MCR-ALS) [3] we were able to separate the scattering curves of monomeric and dimeric species from a complex mixture. Using rigid body modeling with *ab-initio* structure prediction we created a model of the dimer and monomer conformation of barley

Sgt1.

The present study was carried out with financial support from the Ministry of Science and Higher Education (grant number N N202 127237).

[1] C.Azevedo, A.Sadanandom, K.Kitagawa, A.Freialdenhoven, K.Shirasu, P.Schulze-Lefert, *Science*, **2002**,295,2073-2076

[2] Y.Kadota, K.Shirasu, R.I.Guerois, *Trends In Biochemical Sciences*, **2010**,35,199-207

[3] J.Blobel, P. Bernado, D.I. Svergun, R.Tauler, M.Pons, *Journal of American Chemical Society*,**2009**,131, 4378-4386

15:15	Poster	33
-------	--------	----

Structural changes of DPPC bilayers induced by gemini surfactants

Wojciech Kida, Maciej Kozak

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Fizyki, Zakład Fizyki Makromolekularnej (UAM), Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland

e-mail: wk57@wp.pl

Dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) is a phospholipid and also one of a major component of cell membranes. One of the major substances that can strongly interact with phospholipids and induce structural change of phospholipid phases are dicationic (gemini) surfactants. Gemini surfactants are the family of surfactant molecules possessing more than one hydrophobic tail and at least two hydrophilic head groups [1-2].

The research presented was conducted in order to evaluate the influence of bisimidazolium derivatives (quaternary salts at various concentrations) on the structure and phase stability of dipalmitoylphosphatidylcholine in aqueous solutions.

The SAXS measurements has been performed at Beam Line 911-4 at MAX-lab in Lund, (Sweden). Data were recorded in the temperature range 10-45 °C using synchrotron radiation ($\lambda=0.091$ nm) and the Mar 165 CCD detector. The scattering vector range was $0.05 < s < 4 \text{ nm}^{-1}$. All sets of SAXS data have been processed (normalized to the intensity of the incident beam, corrected for detector response and buffer scattering was subtracted) using computer programs BLI7-11 [3] and PRIMUS [4].

The studied surfactant caused destabilization of the lamellar phase typical for DPPC and finally, for the highest surfactant concentration, formation of the unilamellar vesicles – bicellar phase (the observed scattering patterns of DPPC/surfactant systems are very similar to the SAXS patterns reported for the bicellar DPPC/DHPC systems). The temperature range of the main phase transition of DPPC was shifted towards lower temperature with increasing surfactant concentration.

The research was supported by research grant the Ministry of Science and Higher Education (Grant No. N N204 135738).

References

[1] Moulik, S. P., *Current Science.*, 1996, **71**, 368–376.

[2] P. Tyagi, R. Tyagi, *Tenside Surfactants Detergents***46** (2009)

373-382.

[3] M. Knaapila, C. Svensson, J. Barauskas, M. Zackrisson, S.S. Nielsen, K.N. Toft, B. Vestergaard, L. Arleth, U. Olsson, J.S. Pedersen, Y. Cerenius, *J. Synchr. Radiat.* **16** (2009) 498-504

[4] P.V. Konarev, V.V. Volkov, A.V. Sokolova, M.H.J. Koch, D.I. Svergun, *J. Appl. Crystallogr.* **36** (2003) 1277-1282.

15:15	Poster	34
-------	--------	----

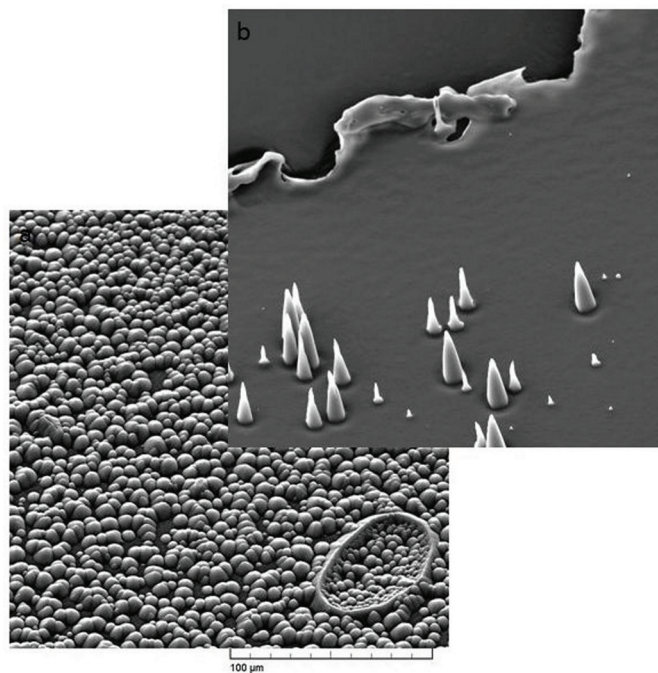
Ablacja i modyfikacja warstwy wierzchniej PVDF z wykorzystaniem promieniowania z zakresu EUV

Barbara Korczyc, Andrzej Bartnik, Henryk Fiedorowicz

Wojskowa Akademia Techniczna, Instytut Optoelektroniki, gen. Sylwestra Kaliskiego 2, Warszawa 00-908, Poland

e-mail: b.korczyc@gmail.com

Naświetlanie polimerów miękkim promieniowaniem rentgenowskim (SXR) lub nadfioletowym (UV) prowadzi do zmian w strukturze chemicznej a w szczególności do zrywania wiązań i fragmentacji łańcuchów polimerowych. W ramach niniejszej pracy badano oddziaływanie promieniowania skrajnego nadfioletu (EUV) z polifluorkiem winylidenu. Badania przeprowadzono za pomocą lasero-wo – plazmowego źródła promieniowania EUV, opartego na dwustrumieniowej tarczy gazowej. Tarcza była formowana poprzez jednoczesne wstrzykiwanie do komory próżniowej ksenonu i kryptonu w otoczeniu helu. W wyniku naświetlania tarczy zogniskowanymi impulsami lasera Nd:YAG działającym z częstotliwością 10 Hz, o energii w impulsie 0,8 mJ, czasie trwania 4 ns, otrzymano promieniowanie EUV z zakresu od 5 do 50 nm. Próbkę naświetlano różną ilością impulsów w płaszczyźnie ogniskowej oraz w pewnej odległości za nią, dzięki czemu uzyskiwano różne intensywności.



Rys. 1. Obrazy SEM polifluorku winylidenu naświetlanego promieniowaniem EUV o małej (a) i dużej (b) intensywności.

Mechanizm trawienia polimerów za pomocą promieniowania EUV i promieniowania synchrotronowego jest podobny. Dla polimerów

obszar interakcji jest ograniczony do bardzo cienkiej warstwy wierzchniej, ze względu na bardzo małą głębokość oddziaływania promieniowania EUV. Dla PVDF promieniowanie jest absorbowane w warstwie o grubości z zakresu od 10 nm dla fotonów o energii 20 eV, do 70 nm dla 100 eV. W wyniku naświetlania następowała ablacja materiału oraz modyfikacja jego powierzchni. Morfologię powierzchni badano za pomocą SEM. Dwie różne struktury otrzymane dla promieniowania o niskiej i wysokiej intensywności przedstawiano na rys. 1. Produkty ablacji zbadano za pomocą QMS.

15:15

Poster

35

Structural properties and compressibility of spinels: More questions than answers

Paweł Piszora¹, Jolanta Darul¹, Waldemar Nowicki¹, Christian Lathe², Stefan Carlson³, Yngve Cerenius³

1. Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry, Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland 2. GeoForschungsZentrum Potsdam, (GFZ), Telegrafenberg A17, Potsdam D-14473, Germany 3. Lund University, MAX-lab, Lund SE-221 00, Sweden

e-mail: pawel@amu.edu.pl

Materials with the spinel structure have been extensively used in many electronic and magnetic applications. Spinel oxides are extremely versatile compounds with general formula AB_2O_4 , where A and B are divalent and trivalent cations, respectively. Various models have been proposed regarding the dominant factors that contribute to the variations of elastic properties with chemical composition and cation distribution in the spinel structure. The similarity of the bulk modulus value for spinel oxides is known to be a consequence of the volumetric dominance of oxide ions with a cubic close-packed structure. The bulk modulus of an oxide ion in these compounds is about 200 GPa [1], and this value is roughly similar to bulk moduli of many spinel oxides, as it has been found empirically and theoretically [1,2]. A local distortion of the coordination polyhedra, due to the Jahn-Teller effect, can lead frequently to deviation from the rule and turn out structures to be controlled by the size and compressibility of cations, as shown in the lithium manganese oxide [3].

There has been a limited number of papers on the crystallite size dependence of the bulk modulus for the spinel structure oxides, and no clear trend has been observed for various materials. From the reported papers, some materials exhibit a decrease of bulk modulus with decreasing particle size, while some nanomaterials show compressibility similar to their bulk counterparts [4]. Materials with opposite tendency are also known. The mineral maghemite, $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ has a cubic spinel type structure. Nanocrystalline maghemite, have been reported as much less compressible than bulk material ($K_0=305 \pm 15$ GPa and $K'_0=203 \pm 10$ GPa for nanocrystalline and bulk material, respectively) [5]. Another sample with a structural formula $\text{Fe}_{13.33}\square_{2.67}\text{O}_{32}$ (where $\square$ denotes vacancy) had an exceptionally low bulk modulus of bulk and nanocrystalline form of $K_0=124 \pm 11$ GPa with $K'_0=30 \pm 7$ and $K_0=143 \pm 14$ GPa with $K'_0=43 \pm 9$ respectively. Here the first derivative values K'_0 are exceptionally high and both deviations have been ascribed to the presence of vacancies on octahedral sites [6].

Another factor affecting the bulk modulus is the distribution of

cations, characterized by inversion parameter. This parameter is defined as the fraction of divalent metal cations that moves to octahedral sites from tetrahedral sites. Theoretical calculations, using the DFT formalism, have indicated sensitivity of the bulk modulus to the inversion parameter in AlCo_2O_4 of $K_0=235.7$ GPa and $K'_0=221.8$ GPa in the normal and fully inverted spinel, respectively [7]. A small change in chemical composition of spinel can lead to significant changes in its compression behavior. The bulk modulus of $\text{Mg}_{0.4}\text{Al}_{0.6}[\text{Al}_{1.8}\square_{0.2}]\text{O}_4$ ('defect sample') is only 171(2) GPa while for stoichiometric disordered spinel MgAl_2O_4 is of 193 GPa [8]. However, in another paper, concerning the equation of state, Nestola et al. [9] have indicated that there are no differences in the bulk modulus for the ordered and disordered spinel samples.

In addition to the above factors, also the measurement conditions affect the results, especially, the pressure hydrostaticity level (dependent on the applied pressure transmitting medium) seems to be crucial for proper interpretation of compression results for oxides with the spinel structure [10,11]. Synchrotron radiation measurements revealed that LiMn_2O_4 displays an extremely sensitive structural response to deviatoric stress [3], however, nanostructured materials can accommodate more stress compared to their bulk counterparts [12].

Our presentation does not only show the new experimental results, but also provides clues to understanding empirical facts concerning structural properties and compression behavior of spinels.

Acknowledgements: The research leading to these results has received funding from the European Community's Seventh Framework Program (FP7/2007-2013) under Grant agreement no 226716.

References

- [1] A.M. Pendás, A. Costales, M.A. Blanco, J.M. Recio, V. Luaña, "Local compressibilities in crystals", *Phys. Rev. B*, **62** (2000) 13970-0-8.
- [2] L. Gerward, J.Z. Jiang, J. Staun Olsen, J.M. Recio, A. Waśkowska, "X-ray diffraction at high pressure and high or low temperature using synchrotron radiation: Selected applications in studies of spinel structures", *J. Alloys Compd.*, **401** (2005) 11-17.
- [3] P. Piszora, W. Nowicki, J. Darul, "High-pressure metaelastic properties of $\text{Li Mn}_{3-x}\text{O}_4$ ($x=0.87; 0.94; 1.00$)", *J. Mater. Chem.*, **18** (2008) 2447-2452.
- [4] B. Chen, D. Penwell, L.R. Benedetti, R. Jeanloz, M.B. Kruger, "Particle-size effect on the compressibility of nanocrystalline alumina", *Phys. Rev. B*, **66** (2002) 144101-1-4.
- [5] J. Z. Jiang, "Phase transformations in nanocrystals", *J. Mater. Sci.*, **39** (2004) 5103-5110.
- [6] H. Zhu, Y. Maa, H. Yang, C. Ji, D. Hou, L. Guo, "Pressure induced phase transition of nanocrystalline and bulk maghemite ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) to hematite ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$)", *J. Phys. Chem. Solids*, **71** (2010) 1183-1186.
- [7] R. Franco, F. Tielens, M. Calatayud, J. M. Recio, "Cation distributions on CoAl_2O_4 and CoAlO spinels: pressure and temperature effects", *Int. J. High Pressure Res.*, **28** (2008) 521-524.
- [8] F. Nestola, J.R. Smyth, M. Parisatto, L. Secco, F. Princivalle, M. Bruno, M. Prencipe, A. Dal Negro, "Effects of non-stoichiometry on the spinel structure at high pressure: Implications for Earth's mantle mineralogy", *Geochim. Cosmochim. Acta*, **73** (2009) 489-492.
- [9] F. Nestola, T. Boffa Ballaran, T. Balic-Zunic, F. Princivalle, L. Secco, A. Dal Negro, "Comparative compressibility and structural

behavior of spinel MgAl_2O_4 at high pressures: The independency on the degree of cation order", *Am. Miner.*, **92** (2007) 1838-1843.

[10] P. Piszora, "In-situ investigations of LiMn_2O_4 at high pressure", *Z. Kristallogr. Suppl.*, **26** (2007) 387-392.

[11] G.D. Gata, I. Kantor, T.B. Ballaran, L. Dubrovinsky, C. McCammon, "Effect of non-hydrostatic conditions on the elastic behavior of magnetite: An in situ single-crystal X-ray diffraction study", *Phys. Chem. Miner.*, **34** (2007) 627-635.

[12] Y. Lin, Y. Yang, H. Ma, Y. Cui, W.L. Mao, "Compressional behavior of bulk and nanorod LiMn_2O_4 under nonhydrostatic stress", *J. Phys. Chem. C*, **115** (2011) 9844-9849.

15:15	Poster	36
-------	--------	----

Crystal structures of mouse thymidylate synthase in complexes with inhibitor

Anna Dowierciał¹, Piotr Wilk¹, Adam Jarmuła¹, Wojciech Rypniewski², Borys Kierdaszuk³, Wojciech Rode¹

1. Instytut Biologii Doświadczalnej PAN (IBD), Pasteura 3, Warszawa 02-093, Poland 2. Instytut Chemii Bioorganicznej PAN (ICHB-PAN), Noskowskiego 12/14, Poznań 61-704, Poland 3. Warsaw University, Institute of Experimental Physics (IEP UW), Hoża 69, Warszawa 00-681, Poland

e-mail: p.wilk@nencki.gov.pl

Thymidylate synthase (TS; EC 2.1.1.45) catalyzes the conversion of deoxyuridine monophosphate (dUMP) and N(5,10)-methylenetetrahydrofolate (mTHF) to deoxythymidine monophosphate (dTMP) and dihydrofolate (DHF) via reductive methylation, in which mTHF serves as both methyl donor and reducing agent. The reaction is a terminal step in the *de novo* pathway leading to dTMP (one of the four building blocks of DNA). Inhibition of TS blocks DNA synthesis and prevents cellular proliferation. Therefore, targeting of TS for inactivation in TS-expressing cells, such as tumor cells, has become a reasonable strategy in the development of drugs for chemotherapy. Many compounds modeled after the substrate (dUMP) or cofactor (mTHF) have been tested as TS inhibitors and some have advanced to clinical trial or become licensed drugs (5-fluorouracil, Raltitrexed, Pemetrexed).

Crystallographic experiments have been shown to be a useful tools for analyzing the mechanism of inhibition, and relationship between inhibitor structure and specificity.

N(4)-OH-dCMP is a substrate analogue, being a potent mTHF-dependent, thus mechanism-based, slow-binding inhibitor of TS ($K_i \sim 50\text{nM}$). Similar to FdUMP, incubated with the cofactor and the enzyme it was shown to form a ternary complex. However, when N(4)-OH-[5^{-3}H]dCMP replaced dUMP in the reaction mixture, ^3H abstraction from the uracyl ring C(5) was not apparent, suggesting, the reaction to be inhibited at an earlier stage than with FdUMP. In solution the equilibrium between rotamers around the C(4)-N⁴ bond is significantly shifted towards *syn* rotamer (relative to pyrimidine N(3), but surprisingly only the *anti* isomer appeared to be the active inhibitor form.

In order to learn the inhibition mechanism, structural studies of TS complexes with N(4)-OH-dCMP were undertaken. Structures of two mouse TS (mTS) complexes with the inhibitor were solved, based on crystals formed by the enzyme protein in the presence of

either only N(4)-OH-dCMP or both N(4)-OH-dCMP and mTHF. The former structure (1,75Å resolution) revealed the mTS-N(4)-OH-dCMP binary complex, as expected, but the latter (1,35Å resolution) showed the enzyme to be involved in a ternary complex with N(4)-OH-dCMP and DHF instead of expected mTHF, suggesting the inhibition to result from an abortive enzyme-catalyzed reaction. In accord with the previous results, in both complexes the *anti* inhibitor isomer was found covalently bound in the active center, and in the ternary complex no indication of proton release from C(5) was apparent.

Acknowledgements: The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education, grant number N N401 0240 36.

15:15	Poster	37
-------	--------	----

Badanie laserowo-plazmowego źródła EUV do modyfikacji powierzchni polimerów

Łukasz Węgrzyński, Andrzej Bartnik, Henryk Fiedorowicz

Military University of Technology (MUT), Kaliskiego, Warsaw 00-908, Poland

e-mail: mrc.vcr@gmail.com

W pracy przedstawiono wyniki badań laserowo-plazmowego źródła skrajnego nadfioletu (EUV) przeznaczonego do modyfikacji powierzchni polimerów. Urządzenie składa się z komory próżniowej, zaworu do wytwarzania tarczy gazowej, zwierciadła EUV oraz lasera impulsowego Nd:YAG. Przedstawione w poniższej pracy źródło promieniowania EUV jest oparte o mechanizm powstawania plazmy w wyniku jonizacji gazu impulsem lasera. Komora próżniowa składa się z trzech połączonych ze sobą sekcji w których znajdują się poszczególne elementy składowe urządzenia. Poszczególne sekcje komory oddzielone są od siebie stalową przegrodą zawierającą odpowiednio dobraną diafragmę przez którą przedostaje się promieniowanie EUV. Tarcza gazowa wytwarzana jest w pierwszej sekcji komory próżniowej poprzez wstrzyknięcie odpowiedniej ilości gazu roboczego w otoczeniu gazu buforowego. W momencie uformowania tarczy gazowej impuls lasera skupiany jest na tarczy gazowej powodując jonizację gazu roboczego, co prowadzi do powstawania plazmy wysokotemperaturowej. Proces wytwarzania tarczy gazowej oraz działania układu laserowego jest w pełni zsynchronizowany w celu poprawnego działania urządzenia. Promieniowanie emitowane przez plazmę skupiane jest za pomocą osiowosymetrycznego zwierciadła elipsoidalnego znajdującego się w drugiej sekcji komory próżniowej. W trzeciej sekcji urządzenia znajduje się zdalnie sterowany uchwyt umożliwiający zmianę położenia naświetlanej próbki. W badaniach wyznaczony został zakres widmowy promieniowania EUV odbitego od zwierciadła EUV. Widmo emitowanego promieniowania posiada intensywne maksimum przy ok. 10 – 11 nm oraz mniej intensywną długofalową część widma sięgającą 70-80 nm. Z uwagi na bardzo silną absorpcję promieniowania EUV w powietrzu, poszczególne elementy składowe źródła umieszczone są w komorze próżniowej. Urządzenie posiada system wydajnych pomp próżniowych zapewniających uzyskanie próżni na poziomie 10^{-5} mbar podczas pracy urządzenia. Dodatkowym elementem urządzenia jest dołączony do źródła kwadрупolowy spektrometr

mas. Umożliwia on obserwowanie w czasie rzeczywistym oraz późniejszą analizę produktów rozkładu materiałów naświetlanych promieniowaniem EUV. Podczas badań wyznaczona została także intensywność promieniowania EUV skupionego w ognisku kolektora, oraz obraz generowanej plamy. W pracy przedstawiono także przykładowe wyniki badań zmian fizycznych oraz chemicznych powstałych na powierzchni naświetlanego polimeru. Analizę zmian fizycznych przeprowadzono wykorzystując skaningowy mikroskop elektronowy SEM, natomiast zmiany chemiczne zbadano dzięki spektroskopii w podczerwieni FTIR oraz spektroskopii fotoelektronów rentgenowskich XPS. Stwierdza się, iż przedstawione źródło w pełni nadaje się do badań w dziedzinie inżynierii materiałowej oraz chemii. Silne zmiany spowodowane przez promieniowanie EUV występują tylko w przypowierzchniowej warstwie naświetlanego materiału (warstwie wierzchniej) nie penetrując głębszych partii materiału. W efekcie możliwe jest uzyskanie zmodyfikowanego materiału o innych właściwościach w porównaniu do właściwości tego samego materiału bez modyfikacji jego powierzchni.

Walne Zebranie PTPS

Monday afternoon, 26 September, 17:00

BREAK

Monday evening, 26 September, 18:30

Tuesday, 27 September

LECTURE

Tuesday morning, 27 September, 9:00

9:00

Invited oral

Processing and analysis of synchrotron diffraction images of protein crystals

Mirosław Gilski

Department of Crystallography, Faculty of Chemistry, A. Mickiewicz University, Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland Center for Biocrystallographic Research, Institute of Bioorganic Chemistry, PAS, Noskowskiego 12/14, Poznań 61-704, Poland

e-mail: mirek@amu.edu.pl

X-ray crystallography is a dominant technique used in determination of the three-dimensional structures of macromolecules. It is the most successful when applied on the third-generation synchrotron sources that allow rapid collection of X-ray data from macromolecular single crystals.

At present there are over 100 synchrotron radiation facilities all over the world and most of them have, usually more than one, dedicated line suitable for X-ray macromolecular diffraction experiments. Recently often they provide full automatic remote access [1,2,3]. In rough estimate, synchrotron stations are capable of producing more than 500,000 data sets per year. Comparing that with the number of structures deposited every year in PDB database (~5000 last ten years average, ~8000 in last year) we can estimate that about 60 data

sets are needed per one successful PDB deposit [4,5,6].

There are many reasons for this situation, including but not limited to, poor or unsatisfactory data quality, problems with automatic/semi-automatic processing and indexing of raw diffraction images or difficulty with structure solving, model building and refinement.

Besides the crystal preparation the first and crucial step in the process of protein structure determination is a proper processing of the collected diffraction images, as they provide the observations which are used throughout the process of structure solution and refinement. The analysis and reduction of single-crystal diffraction data (data processing) consists of several steps like indexing of the diffraction pattern, refinement of the crystal and detector parameters, integration, scaling and statistical analysis of the measurements. Each of this steps can introduce some errors, dependent on data quality and also on algorithm used during the particular task.

After evaluation and refinement of sample's unit cell and crystal orientation, the intensities for the Bragg spots can be determined. Algorithmically it is a very complex task but the most important during whole diffraction data processing. The ultimate result of the processing is a list of reflections which appear on images with their Miller indices (hkl), estimated intensities, and standard deviations.

To analyze single-crystal diffraction data, several computer programs have been developed. To the group of the most popular and used programs belongs: HKL2000 [7], MOSFLM [8], D*TREK [9] and XDS package [10]. First three of them have dedicated Graphical User Interface (GUI) while XDS most often is used as a command line application with very good default parameters in template input file. MOSFLM has the most expanded GUI but all interfaces are to similar extend intuitive and provide reasonable starting values for the parameters essential in the data processing. To find out the advantages and disadvantages of data processing programs, ten very different data sets, including diffraction data from DNA/RNA [Fig. 1] and protein crystals were tested.

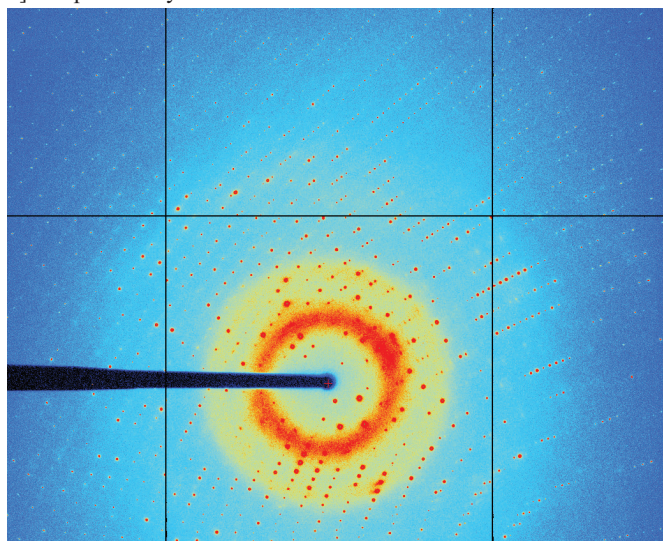


Figure 1. A macromolecular diffraction pattern for a strongly diffracting crystal of Z-DNA collected at Advanced Photon Source (APS), Argonne – beamline 24-ID-C, detector ADSC Q315. The maximum resolution at the edge of the detector is 0.54 Å.

Three of the data sets used during this study derive from macromolecular crystals which structures has been previously solved and

refined. Originally two of them with extremely high resolution – 0.55Å and 0.75Å respectively, were processed by HKL2000. Reprocessing using XDS package gave, in both cases, higher resolution (0.54Å and 0.74Å), similar statistics and significantly larger number of reflections. The MOSFLM and D*TREK gave slightly worse results, rather similar to HKL2000. Visual inspection of the diffraction images of the third data set indicated an evident twinning of the crystal used during data collection [Fig. 2]. All software packages are able to process diffraction images originated from twinned crystals, but after several trials of reprocessing, it turned out that manual separation of not indexed and indexed spots in XDS seems to be fast, easy and the most efficient way to treat not complex twinning. Using this method, after processing the diffraction data of the next crystal, two sets of reflections (from two different lattices existing in the crystal) were obtained with completeness above 96% and good statistics. It means that in one data set are included two different structures of two forms of protein.

Processing the remaining data sets reveals that XDS package with manually edited input file result in very good integrated intensities with the highest resolution and good statistical parameters. The XDS and MOSFLM are much more sensitive than other to the precise values of the direct-beam position while HKL2000 and XDS have somewhat more powerful autoindexing procedure and with default input parameters, they seem to give better merging statistics. The strength of XDS is in its ability to process data using all resources of the computer. Parallel XDS version (xds_par) uses OpenMP for execution by a team of up to 32 threads and relies on a shared memory multiprocessor platform. All packages can be run from a script, which makes them more suited for automation.

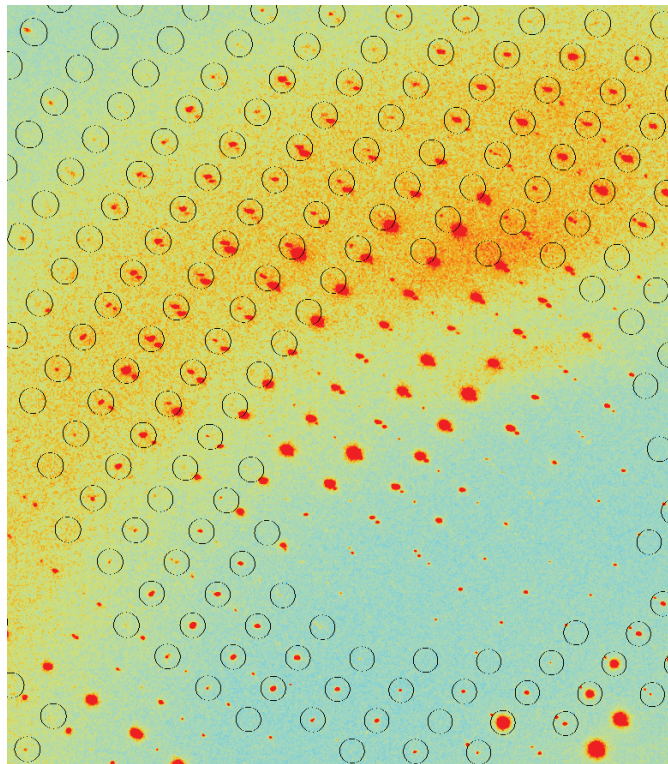


Figure 2. Fragment of the diffraction image with predicted reflections positions superimposed (circles). Not all reflections are predicted, visible spot splitting, associated with the twinning.

It has been found that all the major programs for processing and ana-

lysis of diffraction data give excellent and comparable results with good quality, mid-range resolution data sets, but their treatment of very high resolution or imperfect data differs in terms of indexing, spot integration, scaling and the treatment of errors. The easy cases can be processed with any program, but for the difficult ones the best resolution and statistics were achieved by using the XDS package.

If diffraction data are of good quality and the problem is relatively straightforward the automation approach to data processing may be appropriate. On the other hand, if one is trying to squeeze out as much information from the experimental data as possible, then only expert manual processing can be successful, regardless of the data quality.

References

- [1] M. Gilski, *Acta Physica Polonica A*, Vol. 114(2), 331-338, (2008)
- [2] M. Jaskolski, M. Gilski, *Academia* 2(10), 8-11, (2007)
- [3] M. Gilski, *Synchrotron Rad. in Nat. Science* Vol. 6, No. 1-2 (2007)
- [4] M. Grabowski, M. Chruszcz, M.D. Zimmerman, O. Kirillova, W. Minor, *Infect. Disord. Drug Targets*, 9(5), 459-474, (2009)
- [5] Z. Dauter, M. Jaskolski, A. Wlodawer, *J. Synchrotron Rad.*, 17, 433-444, (2010)
- [6] M. Cymborowski et al. *J. Struct. Funct. Genomics*, 11(3), 211-221, (2010)
- [7] Z. Otwinowski, & W. Minor, *Methods Enzymol.* 276, 307-326, (1997)
- [8] A. G. W. Leslie, *Jnt CCP4/ESF-EACBM Newsl. Protein Crystallogr.* 26, (1992)
- [9] J. W. Pflugrath, *Acta Cryst.* D55, 1718-1725, (1999)
- [10] W. Kabsch, *Acta Cryst.* D66, 125-132 (2010)

9:30

Invited oral

Absorpcja promieniowania synchrotronowego kluczem do tajemnic nanoświata

Anna Wolska

Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

e-mail: wolska@ifpan.edu.pl

Poszukiwanie nowych materiałów mających zastosowanie w technice i przemyśle prowadzi do tworzenia coraz bardziej skomplikowanych struktur. Są wśród nich cienkie warstwy, wielowarstwy oraz wydzielania w strukturach krystalicznych i amorficznych. Obiekty takie często są zbyt małe, żeby można było scharakteryzować je metodami dyfrakcyjnymi. Można je zobaczyć metodami mikroskopowymi, a nawet wykonać mapy rozkładu pierwiastkowego. Jednakże tego typu badania nie są w stanie dokładnie określić jakiego typu związek chemiczny się tworzy.

Promieniowanie synchrotronowe dzięki swoim właściwościom, takim jak wysoka intensywność i kolimacja, stało się uniwersalnym narzędziem w dziedzinie nauki i techniki. Szeroko wykorzystuje się je do badania różnego rodzaju materiałów, od półprzewodników po

preparaty biologiczne. Różnorodność zastosowań promieniowania synchrotronowego łączy się z powstaniem nowych i rozwojem starych technik oraz metod pomiarowych. Jedną z nich jest absorpcja rentgenowskiego promieniowania synchrotronowego. Największą zaletą tej techniki jest jej selektywność ze względu na rodzaj atomu. Oznacza to, że nawet w przypadku złożonych związków, dostrajając energię promieniowania do odpowiedniej krawędzi absorpcji, można skupić się na badaniu otoczenia tylko wybranego pierwiastka. Lokalność i selektywność tej metody daje wyjątkową możliwość określenia jak wiąże się badany pierwiastek w danym materiale bez ograniczeń stawianych przez rozmiary obiektu.

Widmo absorpcji promieniowania rentgenowskiego dla danej krawędzi posiada charakterystyczną strukturę, która zawiera wiele istotnych informacji na temat badanego układu. Analiza subtelnej struktury widm blisko krawędzi absorpcji (do ok. 50 eV powyżej krawędzi) pozwala na określenie lokalnej gęstości stanów, stopnia jonowości oraz typu wiązania tworzonego przez atomy absorbujące. Natomiast analiza tzw. dalekiej subtelnej struktury krawędzi absorpcji (do ok. 1000 eV powyżej krawędzi) daje informacje o liczbie najbliższych sąsiadów, ich średnich odległościach oraz stopniu uporządkowania atomów. Technika ta może być stosowana zarówno dla związków krystalicznych jak i bezpostaciowych. Podczas wykładu przedstawione zostaną przykłady analizy widm absorpcyjnych pokazujące możliwości i użyteczność tej techniki w badaniu różnego typu materiałów.

10:00 Invited oral

Krótkofalowe lasery na swobodnych elektronach - oddziaływanie impulsów z materią stałą

Ryszard Sobierajski

Instytut Fizyki PAN, Al. Lotników 32/46, Warszawa 02668, Poland

e-mail: sobieraj@ifpan.edu.pl

Najbardziej dzisiaj zaawansowanymi źródłami krótkofalowego promieniowania synchrotronowego, tzw. IV generacji są lasery na swobodnych elektronach (FEL) oparte na zasadzie SASE (Self-Amplified Spontaneous Emission). Generują one femtosekundowe impulsy o szczytowej mocy przekraczającej 1 GW promieniowania monochromatycznego w zakresie widmowym od tzw. skrajnego ultrafioletu (EUV) do miękkiego promieniowania rentgenowskiego (SX). Ta szczególna kombinacja parametrów stwarza wyjątkowe możliwości wytwarzania ekstremalnych stanów materii oraz badania struktury materii i dynamiki procesów fizycznych.

Uzyskiwane maksymalne natężenie promieniowania, o maksymalnej wartości rzędu 10^{18} W/cm², wielokrotnie przekracza wartości osiągane za pomocą innych monochromatycznych źródeł rentgenowskich. Pozwala to na wzbudzanie próbki poprzez punkty przemian fazowych nawet do stanu tzw. cieplej gęstej plazmy. Ponieważ czas trwania impulsów – rzędu femtosekund - jest krótszy od stałych czasowych większości procesów związanych ze zmianą struktury atomowej i transportem energii, można jasno je oddzielić od procesów związanych z absorpcją promieniowania. Wysoka energia fotonów (w zakresie EUV-SX) pozwala na uniknięcie nieliniowości (np. efektów wielofotonowych) w procesie absorpcji, co znacznie upraszcza modelowanie zjawisk fizycznych. Dzięki

temu możliwe jest systematyczne badanie zarówno zmian strukturalnych materiałów jak i ich parametrów optoelektronicznych z niespotykaną dotąd rozdzielczością czasową i przestrzenną.

Tematem wykładu jest oddziaływanie silnych, ultrakrótkich impulsów z zakresu od skrajnego nadfioletu do miękkiego promieniowania rentgenowskiego z materią stałą. W pierwszej części wykładu przedstawiona zostanie zasada działania krótkofalowych laserów na swobodnych elektronach oraz główne parametry promieniowania istniejących i budowanych źródeł tego typu. Następnie zaprezentowane zostaną wyniki badań doświadczalnych, wykonanych z udziałem autora, dotyczących zmian parametrów optoelektronicznych oraz zmian strukturalnych w wyniku naświetlenia ciał stałych impulsami ze źródeł VUV FEL (Japonia), FLASH (Niemcy), oraz LCLS (USA).

COFFEE

Tuesday morning, 27 September, 10:30

LECTURE

Tuesday morning, 27 September, 10:45

10:45 Invited oral

Nucleation, aggregation, crystallization and synchrotron radiation

Jan Sędzik

Royal Institute of Technology, Department of Chemical Engineering and Technology (KTH), Teknikringen 28, Stockholm SE10044, Sweden

e-mail: sedzik@kth.se

Lecture focused on mysteries of protein crystallization in a structural biology. Abstract not available at the time of printing.

11:15 Invited oral

Magnetyczna spektroskopia i spektromikroskopia na materiałach spintronicznych

Iwona A. Kowalik¹, Miguel A. Niño², Andrea Locatelli³, Tevfik Onur Menteş³, Alberta Bonanni⁴, Tomasz Dietl^{1,5}, Dimitri Arvanitis⁶

1. *Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw 02-668, Poland* **2.** *IMDEA Nanoscience, Facultad de Ciencias Módulo C-IX, Madrid 28049, Spain* **3.** *Sincrotrone Trieste (ELETTRA), Basovizza (Trieste) 34012, Italy* **4.** *Institut für Halbleiter-und-Festkörperphysik, J. Kepler University, Linz 4040, Austria* **5.** *Institute of Theoretical Physics, University of Warsaw, Warsaw 00-681, Poland* **6.** *Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala 75120, Sweden*

e-mail: ikowalik@ifpan.edu.pl

Pomimo postępów w zakresie badań rozcieńczonych materiałów typu DMS, zrozumienie i kontrola tych materiałów wciąż jest tematem kontrowersyjnym i trudnym dla dzisiejszej inżynierii materiałowej oraz fizyki materii skondensowanej. W szczególności, zrozumienie własności magnetycznych tego typu układów na poziomie atomow-

ym stanowi wciąż otwarty problem. Dla magnetycznie domieszkowanych azotków i tlenków niektóre grupy badawcze raportują tylko paramagnetyczne własności, tymczasem inni znajdują w nich ferromagnetyczny sygnał nawet powyżej temperatury pokojowej, dla teoretycznie takich samych materiałów. Najnowsze prace dotyczące DMS pokazały, że ograniczona rozpuszczalność metali przejściowych w półprzewodnikach prowadzi do rozkładu spinoidalnego oraz separacji faz krystalograficznych w nanoskalowych obszarach, zawierających dużą koncentrację jonów magnetycznych, zatopionych w niemagnetycznej sieci [1,2], jak na przykład Fe N w GaN. Takie efekty zostały już zademonstrowane dla (Ge,Mn), (Ge,Fe), (Ga,Mn)N, (Al,Cr)N, (Ga,Cr)N oraz (Ga,Fe)N [3]. Efekt ten może wnieść zupełnie nowe możliwości zastosowań w przemyśle i technologii, ważne dla spintroniki, nanoelektroniki i fotoniki. Zatopione metaliczne i półprzewodnikowe nanokryształy już zrewolucjonizowały produkcję różnego rodzaju komercyjnych urządzeń, takich jak pamięci typu flash i niskoprądowe lasery półprzewodnikowe. Pytania dotyczące mechanizmu formowania się nanostruktur, jak również kontrola rozmiarów wytrąceń, stanowią wciąż otwarty problem. Nie wiadomo także w jakich warunkach otrzymuje się zatopione wytrącenia ferromagnetyczne, ferrimagnetyczne czy antyferromagnetyczne oraz jak kontrolować ich własności magnetyczne. Obecnie diskutowane jest pochodzenie ferromagnetyzmu w tego typu materiałach, gdyż w większości przypadków teoria średniego pola nie tłumaczy obserwowanych własności magnetycznych. Przedstawione tu wyniki badań oparte są na zrozumieniu problemu od strony atomowego pochodzenia magneto-anizotropii krystalicznej w tego typu układach.

Prezentujemy wyniki badań magnetycznych, wykonanych w temperaturze pokojowej dla warstw (Ga,Fe)N, otrzymane przy użyciu technik spektroskopowych czułych na dany pierwiastek oraz spin, bazujących na miękkim promieniowaniu X [4]. Badane próbki otrzymane zostały metodą metal-organicznej epitaksji z fazy gazowej MOVPE (Metal Organic Vapor Phase Epitaxy) w JKU (Linz, Austria) i scharakteryzowane wcześniej za pomocą magnetometrii SQUID, transmisyjnej mikroskopii elektronowej, rentgenowskich technik dyfrakcyjnych bazujących na promieniowaniu synchrotronowym [3,5] oraz za pomocą techniki EXAFS i XANES [6]. W celu zbadania relacji między strukturą nanokryształów i ich własnościami magnetycznymi, przeprowadzone zostały pomiary XMCD, XLMD oraz XMCD-PEEM na krawędzi L żelaza oraz XMCD na krawędzi K azotu.

Wyniki otrzymane przy zastosowaniu rentgenowskiej fotoemisyjnej mikroskopii elektronowej (X-PEEM) w modzie absorpcyjnym (XAS), wykonane dla krawędzi L żelaza wskazują, że większość atomów Fe uformowała wytrącenia o rozmiarach 30-80 nm (lub mniejsze, poniżej zdolności rozdzielczej PEEM), ale część z nich wbudowana jest jednorodnie w sieć GaN, podstawieniowo w miejscach Ga. Obrazy otrzymane w modzie XAS potwierdzają, że atomy Fe znajdują się w różnych lokalnych otoczeniach. Przy pomocy modu XMCD-PEEM zidentyfikowane zostały magnetyczne nanokryształy bogate w żelazo. Zbadana została także struktura domenowa nanokryształów. Kontrast magnetyczny wyraźnie widoczny jest powyżej temperatury pokojowej w obszarze nanokryształów wielkości 30-40 nm. W przypadku większych nanokryształów obserwowana jest struktura domenowa typu „vortex”. Stosując spektroskopię XAS w modzie XMCD wyzn-

aczony został spinowy i orbitalny moment magnetyczny przypadający na atom Fe. Ponieważ nie wszystkie nanokryształy w badaniach XMCD-PEEM wykazały kontrast magnetyczny, wykonane zostały także badania XLMD. Uzyskane dane pozwoliły zidentyfikować zarówno wkład ferromagnetyczny jak i antyferromagnetyczny - pochodzące od różnych faz nanokryształów. Prezentowane wyniki ilustrują komplementarność rozdzielczych przestrzennie badań X-PEEM i XMCD-PEEM z pomiarami XAS i XMCD bez przestrzennej rozdzielczości.

- [1] T.Dietl, *J. Phys. Cond. Mat.* **19**, 165204 (2007)
- [2] H.Katayama-Yoshida *et al.*, *Phys. Status Solidi (a)* **204**, 15 (2007)
- [3] A. Bonanni *et al.*, *Phys.Rev. B* **75**, 125210 (2007); *Phys. Rev. Lett.* **101**, 135502 (2008).
- [4] I. Kowalik *et al.*, *Phys.Rev. B*, in press [arXiv: 1011.0847].
- [5] A. Navarro-Quezada *et al.*, *Phys.Rev. B* **81**, 205206 (2010).
- [6] M. Rovezzi *et al.*, *Phys. Rev. B* **79**, 195209 (2009).

11:45

Invited oral

Zmiany mikrostruktury nanokryształów chromu pod wpływem wygrzewania – badania metodą dyfrakcji promieniowania synchrotronowego

Dariusz Wardecki¹, Radosław Przeniosło¹, Andy Fitch², Mirko Bukowski³, Rolf Hempelmann³

1. Instytut Fizyki Doświadczalnej, Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski, Hoża 69, Warszawa 00-681, Poland **2.** European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble 38043, France **3.** Institute of Physical Chemistry, University of Saarland, Saarbrücken D66123, Germany

e-mail: dward@fuw.edu.pl

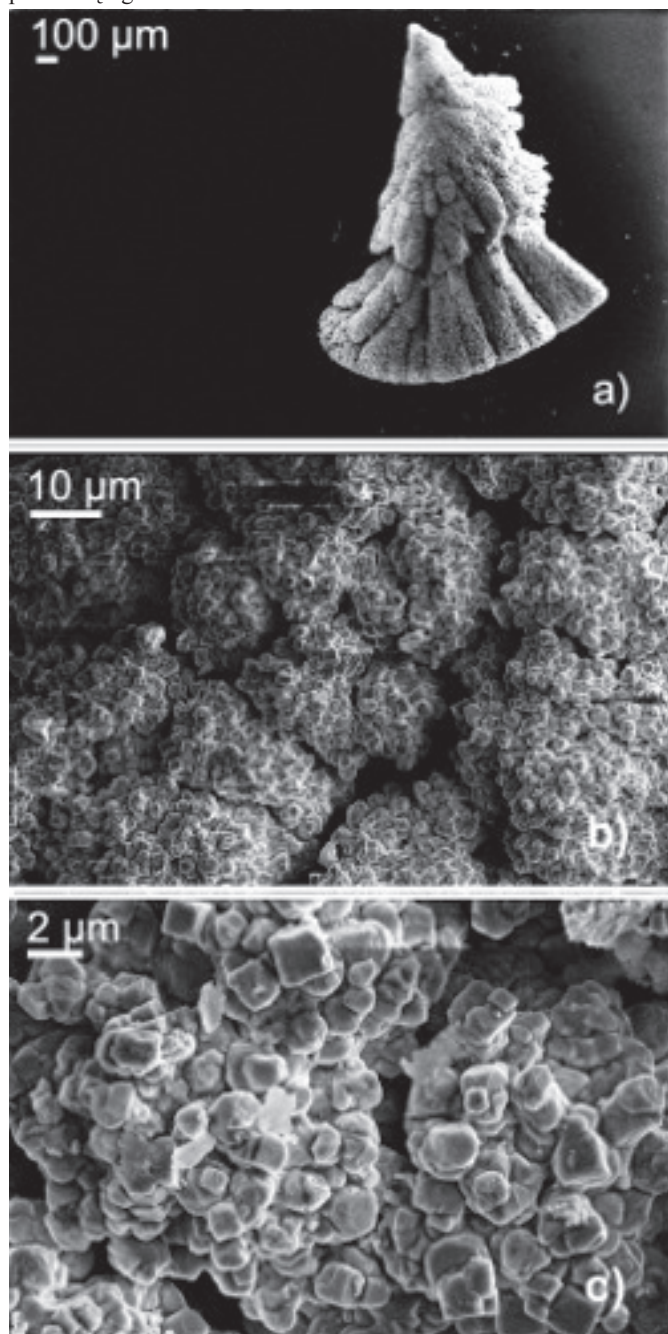
Chrom posiada interesującą strukturę magnetyczną, która wielokrotnie była badana i opisana w literaturze [1]. W monokryształach chromu (a także w próbkach polikrystalicznych), poniżej temperatury Neel'a $T_N = 310$ K, występuje tzw. fala gęstości spinowej z długością modulacji ok. 6.5 nm. Interesującym wydaje się poznanie wpływu rozmiaru małych ziaren chromu (rzędu 25 nm) w tzw. nanokryształach (n-Cr) na wyżej wymienione uporządkowanie magnetyczne.

Niniejsza praca skupia się na analizie mikrostruktury tj. rozmiaru ziaren oraz mikronaprężeń wewnętrznych podczas wygrzewania. Dane uzyskano za pomocą dyfrakcji promieniowania synchrotronowego w n-Cr otrzymanym metodą elektrodpozycji.

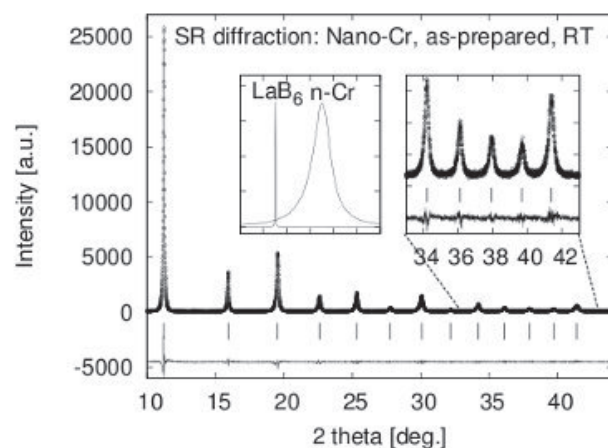
W wyniku procesu elektrodpozycji, przy różnych proporcjach substratów CrO_3 oraz H_2SO_4 , wyprodukowano cztery próbki nanokrystalicznego chromu $^2(\text{n-Cr})$ [2]. Następnie próbki te scharakteryzowano za pomocą pomiarów TEM, SEM oraz EDX. Rysunek 1 przedstawia fotografie próbki n-Cr ze skaningowej mikroskopii elektronowej. Dla różnych powiększeń tej samej próbki widać skupiska krystalitów, które przejawiają cechy samopodobieństwa.

Próbki n-Cr przebadane zostały za pomocą dyfrakcji promieniowania synchrotronowego (SR) w European Synchrotron Radiation Facility w Grenoble (linia ID-31). Rysunek 2 przedstawia wynik

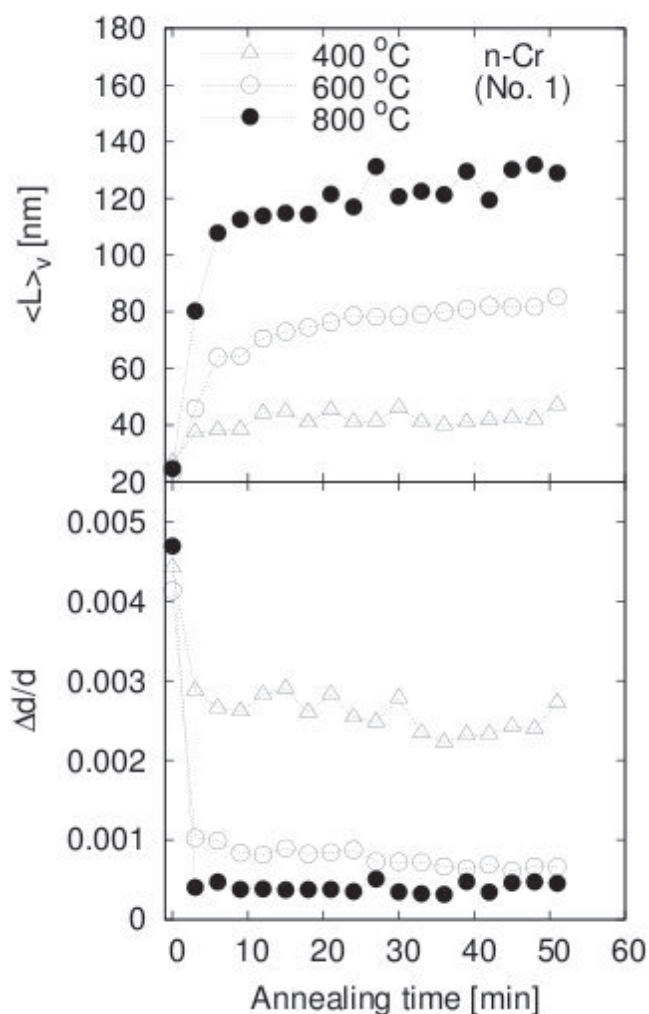
pomiarów dyfrakcyjnych (długość fali $\lambda=0.4 \text{ \AA}$) dla n-Cr w temperaturze pokojowej (punkty) oraz obliczony dyfraktogram (linia ciągła) w oparciu o model struktury chromu bcc [1]. Na powiększeniu po prawej przedstawiony został zakres dużych kątów 2θ , po lewej natomiast maksimum dyfrakcyjne (110) od n-Cr w zestawieniu z maksimum zmierzonym na tym samym dyfrakto-metrze dla próbki odniesienia LaB_6 . Widać, że maksimum Braggowskie od LaB_6 jest ok. 25^6 razy węższe od maksimum pochodzącego od n-Cr.



Rysunek 1. Fotografie SEM wykonane dla próbki n-Cr z następującymi powiększeniami: 60X (a), 2120X (b) oraz 8010X (c). Wg ref. [2].



Rysunek 2. Dyfraktogram proszkowy uzyskany dla próbki n-Cr wraz z dopasowanym modelem struktury. Wg ref. [2].



Rysunek 3. Średni rozmiar ziaren n-Cr oraz naprężenia wewnętrzne w funkcji czasu wygrzewania dla trzech temperatur. Wg ref. [2].

Za pomocą analizy Warrena-Averbacha [3] oraz metody „double-Voigt” [4] wyznaczono rozmiar ziaren $\langle L \rangle_v$ oraz naprężenia wewnętrzne $\Delta d/d$ w zależności od czasu wygrzewania dla temperatur 400°C , 600°C oraz 800°C . Zależność tę przedstawia

Rysunek 3. Widać na nim, że największe zmiany zachodzą w ciągu pierwszych 15 min. wygrzewania oraz, że końcowy rozmiar ziaren zależy od temperatury wygrzewania.

Dalsze szczegóły tych badań są opisane w pracy [2].

Bibliografia

- [1] E. Fawcett, *Rev. Mod. Phys.* 60 (1988) 209.
- [2] D. Wardecki, R. Przeniosło, A. Fitch, M. Bukowski, R. Hempelmann, *J. Nanopart. Res.* 13 (2011) 1151.
- [3] B. Warren, B. Averbach, *J. Appl. Phys.* 21 (1950) 595.
- [4] D. Balzar, *Defect and Microstructure Analysis from Diffraction*, (Oxford University Press, New York, 1999).

12:15

Oral

Investigation of iron and zinc oxidation state in different grades of human brain gliomas using XAFS spectroscopy

Katarzyna Wolska¹, Aleksandra Wandzilak¹, Mateusz Czyżycki¹, Paweł Wróbel¹, Magdalena Szczerbowska-Boruchowska¹, Dariusz Adamek², Edyta Radwańska³, Marek Lankosz¹

1. AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science (AGH), Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland **2.** Department of Neuropathology, Chair of Pathomorphology, Faculty of Medicine, Jagiellonian University, Botaniczna 3, Kraków 31-503, Poland **3.** Department of Neuropathology, Institute of Neurology, Faculty of Medicine, Jagiellonian University, Botaniczna 3, Kraków 31-503, Poland

e-mail: wolska@agh.edu.pl

Brain glioma is the most common form of brain cancer. The aim of this study was to investigate iron and zinc oxidation state of different grades of human brain gliomas. Seven different samples of brain tissue were examined using X-ray absorption near-edge structure (XANES) and extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) methods. We have investigated one abscess sample and samples of II, III and IV grade gliomas (two of each grade). The position of zinc absorption edge suggested that in all samples zinc exist in bounded form Zn (II). Position of iron absorption edge suggested that glioma tissue contains mixture of Fe (II) and Fe (III). A shift of about 1.2-1.5 eV was noticed between iron absorption edge for II grade gliomas and for III or IV grade gliomas. This difference suggested higher Fe (II) content in III or IV grade gliomas than in II grade gliomas. Iron absorption edge for abscess sample was very similar to absorption edge in Fe₂O₃, used as a standard sample. Preliminary EXAFS studies showed small differences between spectra for iron absorption edge for samples of different grade gliomas. This could suggest change in distance to neighboring atoms between different samples.

This work was supported by the following grants: the Ministry of Science and High Education, Warsaw, Poland (N N518 377537), HASYLAB experimental grants (I-20090047 EC and I-20100040 EC) and the European Community's Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) under grant agreement n° 226716.

1. Al-Ebraheem A, Goettlicher J, Geraki K, Ralph S, Farquharson MJ (2010) The determination of zinc, copper and iron oxidation state in invasive ductal carcinoma of breast tissue and normal surrounding tissue using XANES. *X-RAY Spectrometry* 2010, 39, 332-337
2. Szczerbowska-Boruchowska M (2008) X-ray fluorescence spectrometry, an analytical tool in neurochemical research. *X-RAY Spectrometry* 2008, 37, 21-31
3. Yoshida S, Ide-Ekessabi A, Fujisawa S (2003) Application of Synchrotron Radiation in Neuromicrobiology: Role of Iron in Parkinson's Disease. *Structural Chemistry*, Vol. 14, No. 1
4. Huang X (2003) Iron overload and its association with cancer risk in humans: evidence for iron as a cancerogenic metal. *Mutation Research* 533 (2003) 153-171
5. Ke Y, Qian ZM (2007) Brain iron metabolism: Neurobiology and neurochemistry. *Progress in Neurobiology* 83 (2007) 149-173

LUNCH

Tuesday afternoon, 27 September, 12:35

LECTURE

Tuesday afternoon, 27 September, 14:00

14:00

Oral

Influence of substrate on crystallographic quality of Al-GaN/GaN HEMT structures grown by MBE

Aleksandra Wierzbicka, Zbigniew R. Zytewicz, Marta Sobanska, Kamil Klosek, Elżbieta Lusakowska

Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

e-mail: czyzak@ifpan.edu.pl

AlGaN/GaN high electron mobility transistor (HEMT) are promising devices for high frequency and high power applications. Since bulk GaN substrates are not readily available on an industrial scale, they are usually grown on alternative substrates as sapphire or silicon. It is known, however, that growth of lattice mismatched structures leads to formation of large strain and its eventual relaxation, that affect properties of devices.

Aim of this work was to study influence of substrate structure on crystallographic quality of AlGaN/GaN HEMTs grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy (PAMBE). Figures 1a-1c show schematic drawings of the samples studied. As seen, all HEMT structures consist of undoped GaN layer, 20 nm thick AlGaN and 3 nm thick GaN cap. They differ in substrates used: the first HEMT was grown on commercially available 3 μm thick GaN/sapphire template grown by metalorganic vapor phase epitaxy (MOVPE). In the second one the same template was used but with additional 10 μm thick GaN layer grown by hydride vapor phase epitaxy (HVPE). The third HEMT structure was deposited on bulk GaN substrate that was grown by HVPE on MOVPE template and then separated from it (Fig. 1c). All samples were carefully studied with the use of high resolution X-ray diffraction (HRXRD), X-ray reflectivity (XRR) and atomic force microscopy (AFM) techniques to compare their properties.

Figures 1d-1f show high resolution XRD maps of the samples. As seen, diffracted signals from GaN layers overlap with those from substrate GaN, but widths of GaN diffraction peaks differ. Values of the full width at half maximum (FWHM) for asymmetrical -1-124 reflection equal to 0.056° , 0.043° , 0.024° for GaN and to 0.138° , 0.068° , 0.030° for AlGaIn, for the first, second and third sample, respectively. This indicates significant improvement of structural quality of HEMTs when thickness of GaN template increases. Even larger improvement is obtained when bulk GaN substrate is used instead of the template. In all samples AlGaIn layers are fully strained so their in-plane lattice constants are the same as in the underlying GaN.

Additionally, quality of the GaN/AlGaIn interfaces in HEMTs structures were examined by XRR technique. This is very important parameter since enhanced interface roughness leads to scattering of charge carriers in two-dimension electron gas and to reduction of electron mobility. Finally, morphology of surface of the samples was studied by AFM. Results are shown in Figures 1g-1i. RMS values for $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ surface AFM scans are 1.2 nm, 0.9 nm and 0.8 nm for samples 1-3, respectively.

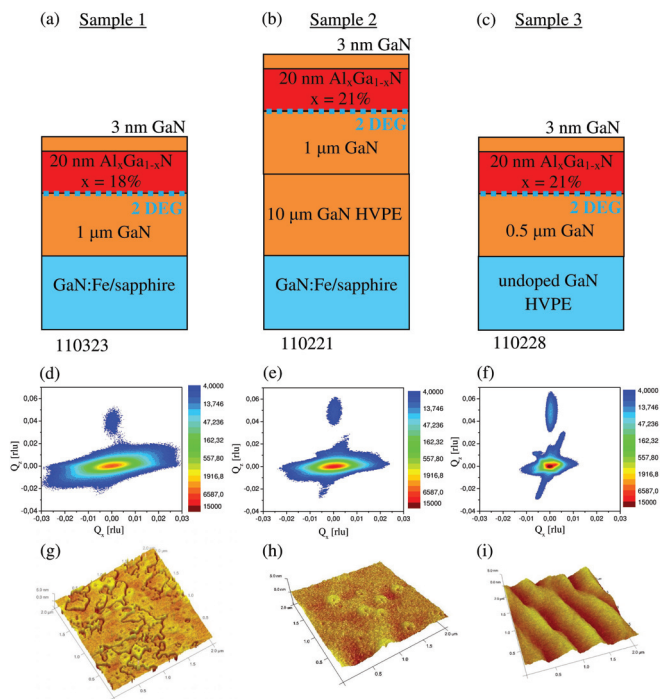


Figure 1. Schematic cross-section of the AlGaIn/GaN HEMTs structures studied in this work (a-c), their HRXRD maps (d-f) and AFM images of their surfaces (g-i).

Acknowledgement: The authors are grateful to B. Łuczniak for supplying the HVPE GaN substrate. This work was partially supported by the European Union within European Regional Development Found, through grant Innovative Economy POIG.01.01.02-00-008/08 NanoBiom.

14:20

Oral

Evaluation of the depth extension of the damages induced by FLASH pulses in silicon crystals

Wojciech Wierzchowski¹, Krzysztof Wieteska², Dorota Klinger³, Ryszard Sobierajski³, Jerzy Pelka³, Danuta Zymirska³, Tomasz Balcer¹, Carsten Paulmann⁴

1. Institute of Electronic Materials Technology (ITME), Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland 2. Institute of Atomic Energy POLATOM, Świerk 05-400, Poland 3. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland 4. University of Hamburg, Mineralogisch-Perigraphisches Institut, Hamburg, Germany

e-mail: wierzc_w@sp.itme.edu.pl

The development of new generation of short radiation sources exploring free electron lasers focussed the interest in the problem of the interaction of the beam generated by these devices with solid matter. The strong excitation of electronic state induced by the beam can here reveal a number of new phenomena, which are important for practical development of optical elements and design of experiments, but also seems to be very interesting in cognitive aspects. The information about the phenomena requires a very careful structural characterization of the craters especially their geometrical features and the lattice deformation.

In our previous experiment the use of back reflection section and projection topography enabled us to reveal many important features of the strain fields connected with the craters. It was in particular possible to demonstrate a significant similarity of the observed strain field to that of rod-like inclusion. The last results seemed to suggest unexpectedly large depth extension of the strain field connected with the craters.

In the present experiment we performed a successful attempt to confirm this observation by taking the synchrotron transmission section white beam topographs using the beam perpendicular to the surface of the sample. Numerous relatively dense series of section topographs spaced by $10 \mu\text{m}$ provided a kind of a precise scan allowing the evaluation of geometrical shape and depth extension some various craters offering also the possibility of comparing the images corresponding to the reflection from different crystallographic planes. In the obtained topographic images we observed the direct image connected with the boundary of the crater accompanied by the some deformation of the Kato fringes. The representative transmission section topograph chosen from the large series is shown in fig. 1.

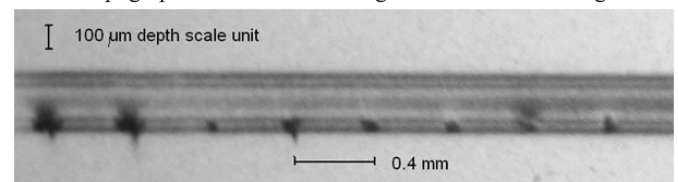


Fig 1 The representative synchrotron topograph, exposed with the beam perpendicular to the sample with FLASH induced craters, chosen from the exposed series to provide the highest extension of their direct images.

The evaluated depth extension was slightly differed for individual craters and was in the range $30 - 100 \mu\text{m}$. This value was confirmed

also by some evaluations basing on the vanishing the images of the series of spots in the Bragg case section topographs obtained when the beam entered the crystal at low 4° angle.

The synchrotron investigations were supported by the HASYLAB project II-20060165 EC

14:40

Oral

Topographic and reflectometric investigation of 4H silicon carbide epitaxial layer deposited at various growth rates

Wojciech Wierzchowski¹, Krzysztof Wieteska², Krystyna J. Mazur¹, Kinga Kościwicz¹, Tomasz Balcer¹, Wlodek Strupinski¹, Carsten Paulmann³

1. Institute of Electronic Materials Technology (ITME), Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland **2.** Institute of Atomic Energy POLATOM, Świerk 05-400, Poland **3.** University of Hamburg, Mineralogisch-Petrographisches Institut, Hamburg, Germany

e-mail: Krystyna.Mazur@itme.edu.pl

4H silicon carbide substrates of good crystallographic perfection and off-cut of 8° , 4° and 0° were systematically investigated with conventional and synchrotron X-ray diffraction topography and X-ray reflectometry before and after the epitaxial deposition performed at 1560°C with CVD method. The samples were grown with three different growth rates 2, 6 and 12 mm/min and the middle of these values was chosen to be most widely used in other technological manufacturing of SiC layers. The layers were not intentionally doped, while the concentration of substitutional aluminum atoms in the n type substrates was at the level of 10^{18} cm^{-3} .

The defect structure was carefully studied before and after the epitaxial layer growth with a number of X-ray methods including white beam and monochromatic beam topography. The white beam topographic investigations were performed both in transmission and back-reflection geometry. In order to examine the dislocations in larger area we applied the conventional transmission Lang topography using Mo K α radiation. The topographic methods enabled the identification of the most of defects present in the sample using both the extinction analysis and the simulation of the diffraction images.

The topographic investigations performed after the deposition of the epitaxial layers in the samples with 8° and 4° off-cut confirmed the continuation of the dislocations in the epitaxial deposit. We did not observe any formation of new dislocations and any other extended defects in the epitaxial all three growth rates.

Contrary to that we found a distinct difference of the surface roughness of the layers deposited at different growth rates: the difference is found to increase with increasing applied growth rate.

The presently applied conditions were not suitable to obtain the

single polytype 4H-SiC epitaxial deposit for the substrates with 0° off-cut, and the obtained layer contained a large amount of differently distributed other polytypes, especially the 3C one. An interesting phenomenon was observed in the case of the layer deposited at 12 mm/min growth rate, when the 3C polytype formed islands of relatively large dimensions reaching single hundreds of microns or even single millimeters. These islands contained several misfit dislocations and other new created defects.

Acknowledgements: The present work was supported by the grant of Ministry of Science and High Education, N N N 505 379737 while the synchrotron investigations were supported by the EC 20100001 HASYLAB project.

15:00

Oral

Badanie absorpcji rentgenowskiej i rezonansowej fotoemisji w cienkich warstwach SrTiO_3 domieszkowanych żelazem

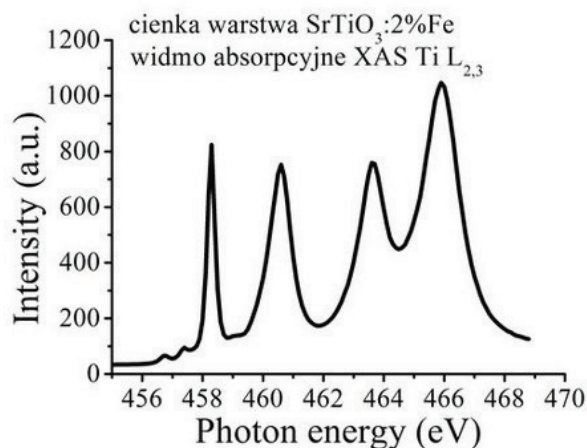
Jerzy M. Kubacki¹, Dariusz Kajewski¹, Marcin Wojtyniak¹, Jacek Szade¹, Annemarie Köhl², Christian Lenser², Regina Dittmann², Rainer Waser², Karina Schulte³

1. University of Silesia, August Chelkowski Institute of Physics, Department of Solid State Physics, Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland **2.** Research Centre Jülich, Institute of Solid State Research (IFF), Jülich, Germany **3.** Lund University, MAX-Lab, Lund 221 00, Sweden

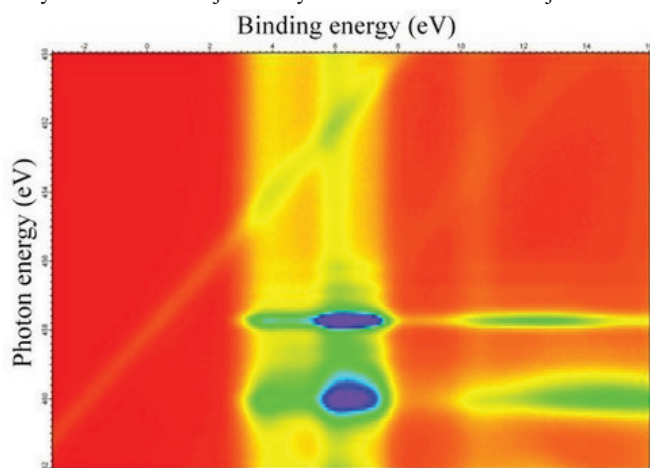
e-mail: jerzy.kubacki@us.edu.pl

Proces przełączania rezystywnego materiałów tlenkowych o strukturze perowskitu jest ostatnio intensywnie badany z uwagi na możliwość zastosowania tych materiałów w przyszłościowych pamięciach RRAM (Resistivity Random Access Memory) o pojemności rzędu 1 Tb. Tytania strontu jest modelowym materiałem o strukturze perowskitu, w którym transport ładunku podczas przełączania rezystywnego jest realizowany poprzez zmianę walencyjności tytanu¹. Efekt przełączania rezystywnego został również stwierdzony dla cienkich warstw SrTiO_3 , w tym domieszkowanych żelazem²⁻⁴.

Metody spektroskopii absorpcyjnej promieniowania rentgenowskiego (XAS) i rezonansowej fotoemisji (RESPE) zostały zastosowane do zbadania stanów elektronowych cienkich warstw SrTiO_3 z dwuprocentową domieszką atomami żelaza. Cienkie warstwy $\text{STO}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}$ zostały wytworzone metodą PLD (Pulsed Laser Deposition) na monokrystalicznym podłożu SrTiO_3 z 0.5% domieszką niobu. Dla badanych próbek otrzymano widmo absorpcyjne dla krawędzi absorpcji $L_{2,3}$ tytanu (rysunek 1), $L_{2,3}$ żelaza, K tlenu oraz mapy intensywności fotoelektronów w zakresie pasma walencyjnego dla energii fotonów w pobliżu rezonansów (rysunek 2).



Rysunek 1. Widmo absorpcyjne XAS dla krawędzi L_{2,3} tytanu otrzymane dla cienkiej warstwy SrTiO₃ domieszkowanej 2% żelaza.



Rysunek 2. Mapa zmian intensywności natężenia fotoelektronów w zakresie energii fotonów dla rezonansu Ti2p – 4d.

Wykonano analizę pasma walencyjnego, zwłaszcza w obszarze przerwy energetycznej, gdzie są usytuowane stany elektronowe odpowiedzialne za dobrze przewodzące filamenty. W tym rejonie energii wiązania stwierdzono występowanie niewielkiego natężenia rezonansowej fotoemisji dla krawędzi tytanu i znaczne wzmocnienie stanów pochodzących z żelaza. Pozwoli to na określenie charakteru przewodnictwa elektrycznego związanego z przełączaniem rezystywnym, w kontekście wykonywanych obliczeń struktury elektronowej.

Oprócz rezonansowego wzmocnienia natężenia fotoemisji dla stanów 3d tytanu w zakresie energii wiązania 4-8 eV, zaobserwowano także wzmocnienie stanów tytanu dla energii wiązania 10 – 16 eV. Otrzymane wyniki pozwolą zbadać naturę tych stanów, które do tej pory nie były znane.

Dla warstwy STO:2%Fe stwierdzono występowanie niewielkich różnic w fotoemisji z obszaru przerwy energetycznej po spolaryzowaniu jej przy pomocy ruchomej elektrody o napięciu +10V. Eksperyment miał na celu poznanie natury efektu, tzw. elektroformowania, niezbędnego do uzyskania stabilnego przełączania rezystywnego.

Przeprowadzone badania były finansowane przez NCBiR, projekt NCBiR/ERA-NET-MATERA/3/2009.

Literatura

- [1] K. Szot, W. Speier, G. Bihlmayer, R. Waser, *Switching the electrical resistance of individual dislocations in single-crystalline SrTiO₃*, Nature Materials 5, 312 (2006)
- [2] K. Szot, R. Dittmann, W. Speier, R. Waser, *Nanoscale resistive switching in SrTiO₃ thin films*, Physica Status Solidi –Rapid Research Letters 1, R86 (2007).
- [3] D. Kajewski, R. Wrzalik, M. Wojtyniak, M. Pilch, J. Szade, K. Szot, Ch. Lenser, R. Dittmann, R. Waser, *Local conductivity of epitaxial Fe-doped SrTiO₃ thin films*, Phase Transitions 84, 483 (2011)
- [4] J. Szade, K. Szot, M. Kulpa, J. Kubacki, Ch. Lenser, R. Dittmann, R. Waser, *Electronic structure of epitaxial Fe-doped SrTiO₃ thin films*, Phase Transitions 84, 489 (2011)

15:20

Oral

Valence band of tungsten compounds probed using 2p5d RIXS

Marcin Sikora¹, Pieter Glatzel²

1. AGH University of Science and Technology (AGH), al. Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland 2. European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

e-mail: marcin.sikora@agh.edu.pl

Heavy transition metals of 5d series are important additives in a wide spectrum of industrial applications, due to high melting temperatures, good surface stability, excellent mechanical strength, and corrosion resistance. They are common ingredients in catalytic converters as well as opto- and spin electronics devices.

Electronic structure of the late 5d elements is routinely probed *in-situ* using X-ray absorption spectroscopy (XAS), due to high sensitivity of the $L_{2,3}$ -edge spectral shape to the occupation of d orbitals. However, in the case of the early 5d elements the XAS spectral changes are less pronounced, due to smaller relative change in the occupation of empty states upon electron transfer, which makes difficult the quantitative analysis. There, X-ray emission spectroscopy (XES), a technique probing density of occupied valence states, is more appropriate. It gives an element and symmetry sensitive insight into the electronic structure of occupied bands. A combination of the two techniques, namely 2p Resonant X-ray Emission Spectroscopy (RXES) and 2p5d Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS), provide researchers with detailed information on electronic structure of core levels and valence band, respectively, with bulk sensitivity.

In this contribution we present an overview of the evolution of tungsten electronic structure in a series of tungsten compounds – oxides, carbides, silicates and sulphides – as revealed by RIXS and RXES upon excitation at W $L_{2,3}$ -edge. We observe that electronic structure of core levels, even the shallow ones, is insensitive to the local environment. Also the bandwidth of valence band does not reveal significant differences among the compounds studied, except for WO₂ (see Fig.1). However, the intensity and fine structure of the spectra reveal small differences among all the studied compounds, that can be related to local structure and coordination type. The experimental

spectra can be nicely reproduced using multiple-scattering approach (FEFF 9 or FDMNES) providing a way for their detailed analysis and leading to potential use of the technique in chemical characterization of a wide class of technologically relevant materials.

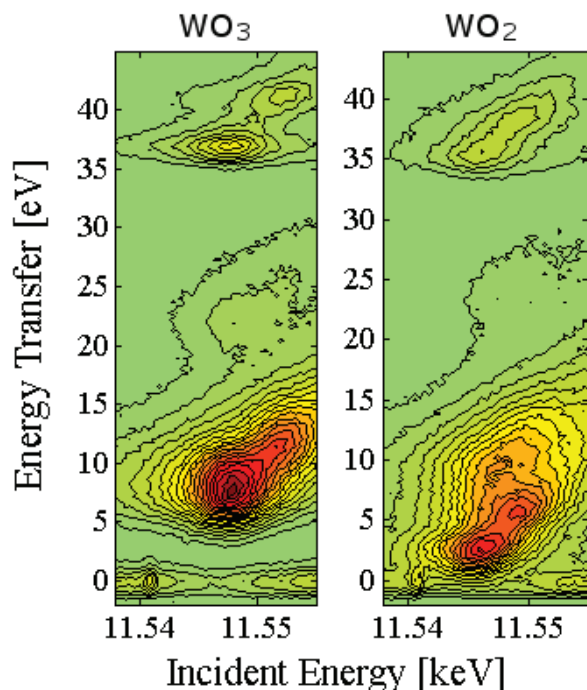


Figure 1. Contour plots of the valence band RIXS in WO_2 and WO_3 probed at $\text{W L}_{2\text{-edge}}$.

Acknowledgements: European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, is acknowledged for providing beamtime. MS acknowledges support from Polish Ministry of Science and Higher Education, grants ESRF/73/2006 and N N202 071539.

15:40

Oral

Struktura nowych kompleksów miedzi(II) i cynku(II) z pochodnymi benzofuranu – badania z wykorzystaniem absorpcji i dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego

Aleksandra M. Drzewiecka^{1,2}, Marcin T. Klepka¹, Anna Wolska¹, Anna E. Koziol²

1. Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland 2. Maria Curie-Skłodowska University, Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska 3, Lublin 20-031, Poland

e-mail: adrzew@ifpan.edu.pl

Ciągle rosnące zagrożenie chorobami cywilizacyjnymi jest przyczyną poszukiwania nowych leków, które są skuteczne, tanie i nietoksyczne. Zauważa się, iż koordynowanie jonów metali do aktywnych farmakologicznie ligandów może zwiększyć aktywność wyjściowego związku. W tym celu przeprowadzono reakcje kompleksowania, a następnie badania strukturalne, dla kilku serii pochodnych benzofuranu.

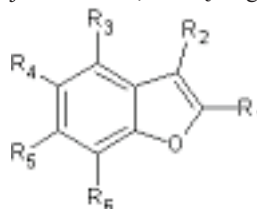
Analizie poddano nowo otrzymane kompleksy cynku i miedzi z organicznymi ligandami *O*-donorowymi (Rys. 1). Wisnaginon (2) i kelinon (3) oraz ich pochodne (metoksybenzofurany) posiadają różne właściwości biologiczne, począwszy od działania przeciw-

drobnoustrojowego poprzez działanie antyarytmiczne i antymiażdżycowe, kończąc na aktywności antyfidantnej oraz właściwościach aflatoksynicznych [1]. W ostatnich latach można zauważyć duże zainteresowanie tą grupą związków ze względu na możliwość ich zastosowania w leczeniu chorób autoimmunologicznych, głównie stwardnienia rozsianego [2]. Badania przeciwnowotworowe wykonane dla serii kwasów benzo[b]furano-karboksylowych i ich estrów wykazały ich silnie działanie hamujące wzrost komórek raka nerek, niedrobnocziarnistego raka płuc oraz białaczki [3,4]. Ponadto, badania mikrobiologiczne w przypadku jednego z prezentowanych kwasów (związek 5) wykazały inhibicję wzrostu komórek grzybowych w odniesieniu do stosowanego wzorca, którym był amiodaron [5].

Celem przeprowadzonych badań było ustalenie sposobu wiązania jonów cynku i miedzi w otrzymanych kompleksach, z ligandami o różnej budowie chemicznej. Do badań wykorzystano rentgenowską analizę strukturalną oraz absorpcyjną spektroskopię rentgenowską (XANES i EXAFS).

Wykazano, że kompleksy z jonami Cu(II) powstawały dla każdego użytego liganda, zarówno z pochodnymi, w których deprotonacji ulegała grupa $-\text{OH}$ jak i $-\text{COOH}$, natomiast kompleksy z jonami Zn(II) uzyskano jedynie gdy ligandami były kwasy karboksylowe [1].

Rentgenowska analiza strukturalna pozwoliła na określenie struktury cząsteczek i budowy wielościanów koordynacyjnych trzech reprezentatywnych kompleksów, które uzyskano w postaci monokryształów. Uzyskane informacje o budowie kompleksów posłużyły do zbudowania startowego modelu sfery koordynacyjnej jonów metali, niezbędnego do analizy widm EXAFS.



	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆
1	CH ₃	H	H	OH	C(=O)CH ₃	H
2	H	H	OCH ₃	C(=O)CH ₃	OH	H
3	H	H	OCH ₃	C(=O)CH ₃	OH	OCH ₃
4	COOH	CH ₃	H	H	OCH ₃	C(=O)CH ₃
5	COOH	CH ₃	H	Br	OH	C(=O)CH ₃
6	CH ₃	COOH	H	OH	C(=O)CH ₃	H
7	CH ₃	COOCH ₃	H	OH	C(=O)CH ₃	H

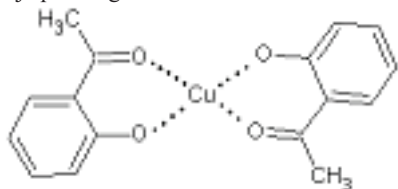
Rys. 1. Schemat budowy ligandów - pochodnych benzofuranu (1–7)

Stopień utlenienia metali w badanych kompleksach określono z jakościowej analizy widm XANES. Polegała ona na porównaniu energetycznego położenia krawędzi absorpcji metali w badanych związkach względem odpowiednich wzorców, mianowicie tlenku miedzi(I) oraz tlenku miedzi(II). Stwierdzono, iż analizowane związki zawierają kationy Cu(II).

Z analizy widm EXAFS wyznaczono średnią liczbę koordynacyjną oraz rodzaj atomów w najbliższym otoczeniu jonów Cu i Zn.

Dla serii kompleksów miedzi(II) z ligandami, w których deprotonacji ulegała grupa $-\text{OH}$ obserwuje się podobne chelatujące otoczenie wokół kationu metalu. Parametry dopasowania z analizy EXAFS oraz rentgenowska analiza strukturalna dla reprezentatywnego kom-

pleksu pozwalają stwierdzić, iż wszystkie kompleksy charakteryzują się liczbą koordynacyjną równą 4. Wielościann koordynacyjny budowany jest przez cztery atomy tlenu: dwa atomy zdeprotonowanej grupy hydroksylowej i dwa atomy grupy acetylowej (Rys. 2). Dla całej serii kompleksów spodziewaną koordynacją jest koordynacja płaskiego kwadratu.



Rys. 2. Schemat koordynacji kationu metalu w kompleksach miedzi(II) z hydroksy-benzofuranami

Analiza widm EXAFS dla kompleksu miedzi(II) z ligandem, w którym deprotonacji uległa grupa $-\text{COOH}$, i którego stereochemia w fazie stałej została określona za pomocą rentgenowskiej analizy strukturalnej, pozwoliła stwierdzić, iż w pierwszej strefie koordynacyjnej jonu znajdują się cztery atomy tlenu oraz jeden jon miedzi. Związek ten jest kompleksem dwurzeniowym. Dla pozostałych dwóch kompleksów miedzi(II) z ligandami karboksylanowymi, obserwuje się jedynie cztery atomy tlenu w pierwszej strefie koordynacyjnej. Uzyskane wyniki nie wskazują na tworzenie się charakterystycznych dla miedzi(II) kompleksów wielordzeniowych.

Na podstawie analizy widm EXAFS kompleksów cynku(II) z ligandami o zdeprotonowanej grupie $-\text{COOH}$ stwierdzono obecność pięciu atomów tlenu w pierwszej strefie koordynacyjnej. Korzystając z informacji uzyskanych z rentgenowskiej analizy strukturalnej dla jednego z kompleksów, można wywnioskować, iż wokół centrum metalicznego tworzy się piramida tetragonalna budowana przez cząsteczki wody oraz atomy tlenu grup karboksylanowych.

Zastosowanie rentgenowskiej spektroskopii absorpcyjnej do określenia otoczenia jonów cynku i miedzi w nowo otrzymanych kompleksach z pochodnymi benzofuranu, pozwoliło wyjaśnić sposób wiązania jonów metali przez koordynujące ligandy.

Podziękowania

Autorzy wyrażają podziękowanie za finansowanie z 7-mego projektu ramowego - projekt ELISA (FP7/2007-2013), numer kontraktu 226716.

Literatura

- [1] Drzewiecka A. (2010) „Struktura potencjalnych ligandów O-donorowych i ich kompleksów organicznych z jonami metali”, *Rozprawa doktorska*, UMCS Lublin.
- [2] Harvey A. J., Baell J. B., Toovey N., Homerick D., Wulff H. (2006) “A new class of blockers of the voltage-gated potassium channel Kv1.3 via modification of the 4- or 7-position of khellinone”, *J. Med. Chem.* 49, 1433–1441.
- [3] Kossakowski J., Ostrowska K., Hejchman E., Wolska I. (2005) “Synthesis and structural characterization of derivatives of 2- and 3-benzo[b]furan carboxylic acids with potential cytotoxic activity”, *Il Farmaco* 60, 519–527.
- [4] Ostrowska K. (2007) „Synteza nowych pochodnych kwasów 2- i 3-benzo[b]furano-karboksylowych i 7-benzo[b]furanolu o spodziewanym działaniu biologicznym”, *Rozprawa doktorska*, AM

Warszawa.

[5] Courchesne W. E., Hejchman E., Maciejewska D., Kossakowski J., Ostrowska K. (2008) “Antifungal compounds”, *Patent Application* Nr US2009/0270496.

16:00

Oral

X-ray measurements of type II InAs/GaSb superlattice in a wide angular range using the P08 beamline at PETRA-III

Iwona Sankowska¹, Jarosław Domagała^{1,2}, Oleksandr Yefanov^{3,4}, Agata Jasik¹, Kazimierz Regiński¹, Oliver H. Seeck⁴

1. Institute of Electron Technology, Al. Lotników 32/46, Warsaw 02-668, Poland **2.** Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland **3.** V.Lashkarev Institute of Semiconductor Physics, Kiev 03680, Ukraine **4.** Deutsches Elektronen Synchrotron DESY, Notkestraße 85, Hamburg D-22607, Germany

e-mail: isanko@ite.waw.pl

The aim of this work was to characterize the type II InAs/GaSb superlattice (SL). In such structure several flat layers form a period which is then repeated tens or hundreds of times. The quality of the SL depends on the reproducibility of the layers parameters, such as composition, strain and thickness, in different periods during whole growth process. The quality of the grown superlattice can be judged by the contrast and full width at half maximum (FWHM) of satellite peaks observed in diffraction profile, especially for higher orders [1]. This is the reason why as many as possible higher order satellite peaks should be measured. In this paper we investigated InAs/GaSb superlattice formed by 30 periods, each consisted of four layers. The thicknesses of each layer were few nanometers and less. It is quite difficult to maintain a constant thickness of such thin layers in different periods during the growth process, therefore the quality control of the grown SL is crucial.

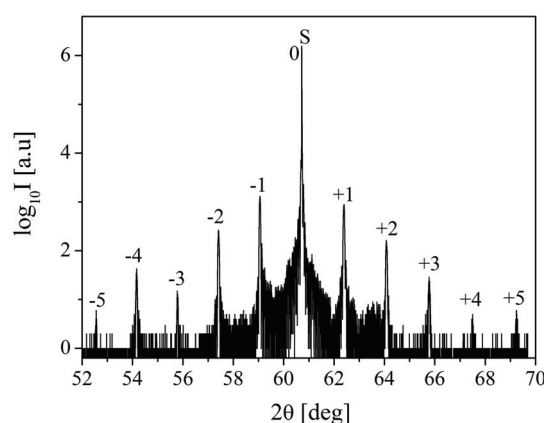


Figure 1. Experimental diffraction profile of the 004 reflection for a InAs/GaSb superlattice measured at a laboratory diffractometer.

Figure 1 shows the diffraction curve of the 004 reflection of investigated periodic structure measured in our laboratory by a high resolution diffractometer. The substrate S and satellite peaks are presented. As can be seen, the intensities of higher ordered peaks (± 4 ; ± 5) are very low. These peaks are important to measure the quality of

periodic structure, but due to the fast drop of diffracted intensity far from a Bragg peak, the flux, produced by a laboratory source, is too low to achieve enough signal for higher order peaks. For this purpose the wide angle X-ray diffraction measurement on the beamline P08 at PETRAIII, DESY has been carried out. Numerous satellite peaks which are present on $2\theta/\omega$ in Fig. 2 confirm good reproducibility of the layers parameters in different periods. Furthermore, due to the big range of the scattering angles (2θ), two satellite groups belonging to the 002 and 004 reflections are observed. It can be seen from the Fig.2 that the SL peaks of these two groups do not coincide what may incorrectly suggest that the periodicity of the structure is not maintained.

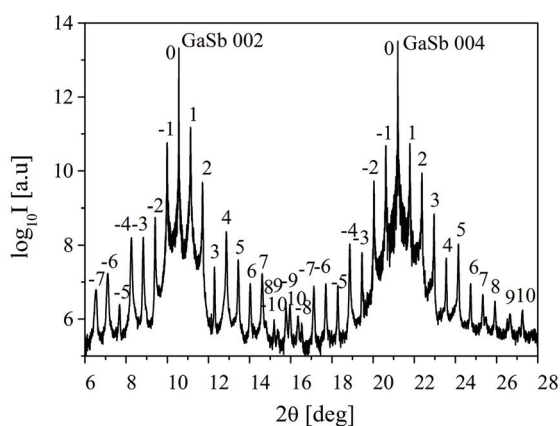


Figure 2. Synchrotron diffraction pattern of periodic InAs/GaSb structure measured around the 002 and 004 substrate reflections.

Calculations of the diffraction pattern of the investigated superlattice have been performed. X-ray diffraction curve was simulated by using a commercial software. As can be seen from Fig. 3, only one reflection 004 was calculated for the wide angle range. The conventional 2-wave diffraction theory cannot describe correctly the measured diffraction curve. Therefore, we will present the N -beam dynamical diffraction approach [2] which makes possible to simulate diffraction pattern in a broad angular range including several reflection (in this case three). Results of this calculation for a high quality superlattice will be presented.

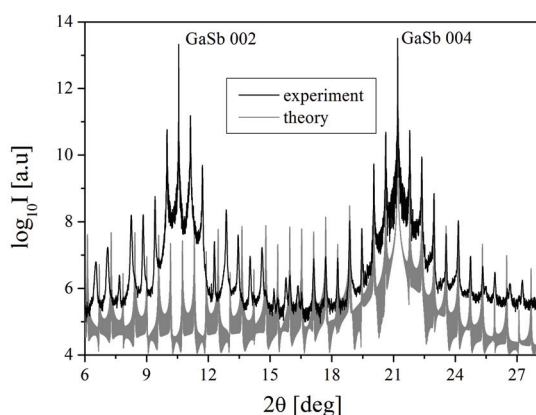


Figure 3. Comparison of experimental synchrotron profile (black line) with simulated one (gray line).

Acknowledgements: The authors would like to thank J. Kaniewski

for helpful cooperation. This work was partially supported by the Polish Ministry of Science and Higher Education under projects No. PBZ- MNiSW 02/I/2007 and NCBiR No. 02 0023 06.

References

- [1] D.K. Bowen, B.K. Tanner, High Resolution X-ray Diffractometry and Topography, Taylor & Francis Ltd, London, (1998) pp 140
- [2] O.M. Yefanov, V.P. Kladko, V.F. Machulin, V.B. Molodkin, Dynamical X-rays Diffraction in Multilayered Structures. Kiev: Naukova Dumka (2008)

16:20

Oral

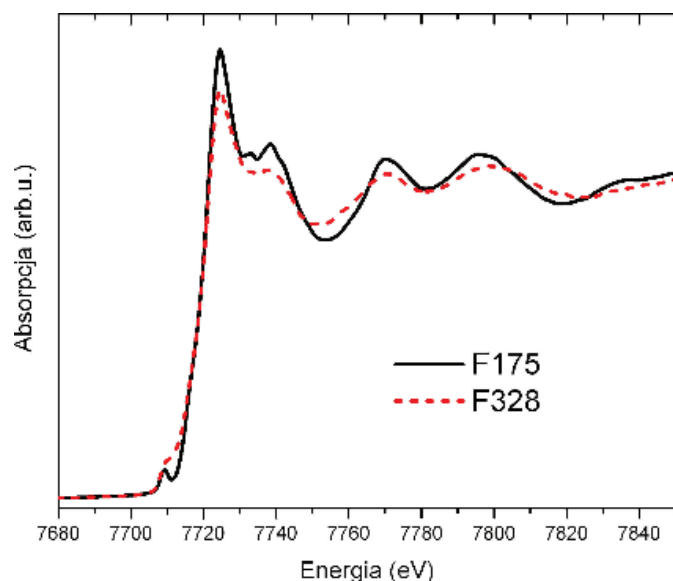
Lokalne otoczenie atomów kobaltu w cienkich warstwach ZnCoO

Anna Wolska, Marcin T. Klepka, Bartłomiej S. Witkowski, Małgorzata I. Łukasiewicz, Elżbieta Guziewicz, Marek Godlewski

Polish Academy of Sciences, Institute of Physics, al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

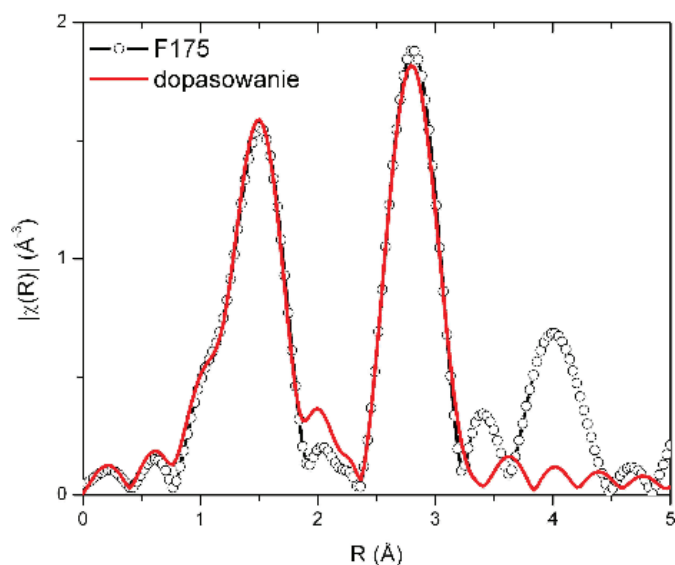
e-mail: wolska@ifpan.edu.pl

Wśród materiałów na bazie ZnO do zastosowań spintronicznych, ZnCoO wzbudza największe zainteresowanie i najwięcej kontrowersji. Jest to niewątpliwie jeden z najszerzej badanych, a jednocześnie najmniej rozumianych materiałów spintronicznych. Choć faza ferromagnetyczna (FM) w temperaturze pokojowej ZnCoO była raportowana już w roku 2001 [1], natura fazy FM jest ciągle niewyjaśniona [2]. Wiązano ją z występowaniem: (i) defektów sieci ZnO [3]; (ii) wytrąceń obcych faz (na przykład CoO) [4]; (iii) wytrąceń metalicznych kobaltu [5]; (iv) niesparowanych spinów na granicy obszarów ZnCoO o wyższej zawartości kobaltu [6]. Wytrącenia te mogą mieć rozmiary rzędu kilku nanometrów, dlatego są trudne do wykrycia metodami konwencjonalnymi. Technika doskonale nadająca się do tego typu badań jest rentgenowska spektroskopia absorpcyjna. Jej podstawową zaletą jest selektywność pierwiastkowa oraz duża czułość - badania można przeprowadzać nawet dla niewielkiej koncentracji danego pierwiastka. Techniki XANES - bliskokrawędziowa (X-ray near edge fine structure) oraz EXAFS - rozciągnięta struktura subtelna (extended X-ray absorption fine structure) absorpcji pozwalają na zbadanie otoczenia lokalnego danego pierwiastka.



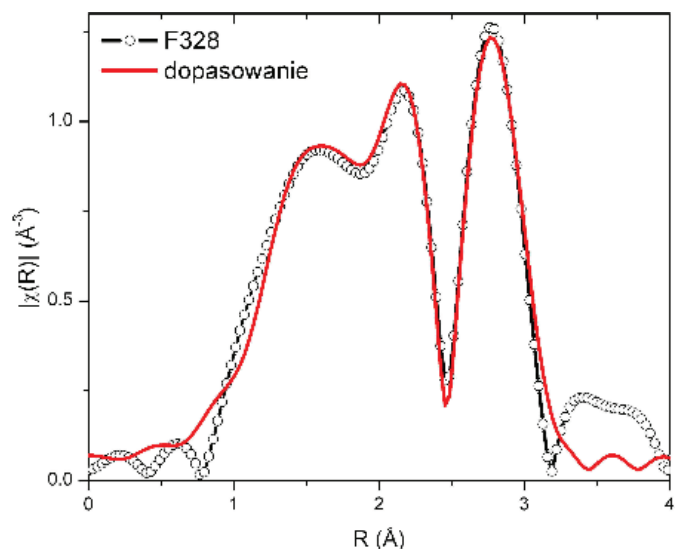
Rysunek 1. XANES na krawędzi K Co dla przykładowych próbek różniących się otoczeniem atomów kobaltu.

Cienkie warstwy ZnCoO prezentowane w tej pracy wykonane zostały metodą osadzania warstw atomowych, ALD (atomic layer deposition). Użycie tej unikatowej metody technologicznej umożliwiło osadzanie warstw ZnCoO o wysokiej jednorodności rozkładu kobaltu. Badane były warstwy o koncentracji Co od około jednego do kilkunastu procent. Ich własności magnetyczne zmieniały się od paramagnetyzmu do ferromagnetyzmu.



Rysunek 2. Wynik dopasowania modelu teoretycznego do widma eksperymentalnego. Wszystkie atomy Co wbudowują się w strukturę ZnO w pozycje cynku.

Pomiary absorpcji promieniowania synchrotronowego zostały przeprowadzone w laboratorium Hasylab na stacji Cemo. Wykonano pomiary widm XANES i EXAFS na krawędzi K kobaltu na próbkach schłodzonych do temperatury ciekłego azotu i przy użyciu detektora fluorescencyjnego. Dodatkowo metodą transmisyjną zmierzono widma komercyjnych proszków CoO, Co₃O₄ oraz cienkiej folii Co. Uzyskane dane były analizowane przy pomocy programów Athena i Artemis wchodzących w skład pakietu IFEFFIT [7].



Rysunek 3. Wynik dopasowania modelu teoretycznego do widma eksperymentalnego. Część atomów Co wbudowuje się w strukturę ZnO w pozycje cynku, reszta tworzy wydzielenia kobaltu metalicznego widoczne jako dodatkowy pik w odległości ok. 2.1 Å.

Widma XANES zmierzonych próbek można podzielić na dwie grupy. Na rysunku 1 grupę pierwszą reprezentuje próbka F175, zaś drugą próbkę F328. Prepek w pozycji 7709 eV w widmie próbki F175 odpowiada przejściom 4p do 3d i wskazuje na symetrię tetraedryczną. [8] Można stąd wnioskować, że w przypadku grupy pierwszej, atomy kobaltu najprawdopodobniej wbudowane są w strukturę ZnO podstawiając Zn. Główna różnica pomiędzy widmami obu próbek leży w intensywności pików, nie w różnicy ich położenia. Wskazuje to na to, że w próbkach grupy drugiej również dominuje Co w pozycji podstawieniowej, ale obecna jest także druga, inna faza.

Wnioski te potwierdza analiza widm EXAFS. Transformaty Fouriera dla obu próbek różnią się znacząco. Widmo próbki F175 można dopasować przy pomocy modelu ZnO, gdzie atomy Co wbudowują się w pozycje cynku. Natomiast w widmie próbki F328 pojawia się dodatkowy pik w odległości ok. 2.1 Å. Odpowiada on wydzielonom kobaltu metalicznego. Dopasowanie uwzględniające oba modele pokazuje, że część atomów Co wbudowuje się w strukturę ZnO w pozycje cynku, reszta zaś tworzy wydzielenia kobaltu metalicznego.

Porównanie wyników absorpcji z własnościami magnetycznymi badanych warstw pokazało wyraźne korelacje. Silny ferromagnetyzm obserwowany jest tylko dla próbek z wydzielieniami metalicznego kobaltu.

Podziękowania: Autorzy wyrażają podziękowanie za finansowanie Unii Europejskiej z projektu *European Regional Development Fund* w ramach grantu *Innovative Economy* (POIG.01.01.02-00-008/08) a także z 7-mego projektu ramowego - projekt ELISA (FP7/2007-2013), numer kontraktu 226716.

Literatura

- [1] K. Ueda, H. Tabata, T. Kawai, *Appl. Phys. Lett.* **79** (2001) 988.
- [2] A. Ney, *et al. Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 157201.
- [3] J. M. D. Coey, K. Wongsaprom, J. Alaria, M. Venkatesan, *J. Phys.D: Appl. Phys.* **41** (2008) 134012.

- [4] A. J. Behan, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.***100** (2008) 047206.
- [5] J.H. Park, M.G. Kim, H.M. Jang, S. Ryu, Y.M. Kim, *Appl.Phys. Lett.* **84** (2004) 1338.
- [6] A. Bonanni and T. Dietl, *Chemical Society Reviews***39** (2010) 528.
- [7] B. Ravel and M. Newville, *J. Synchrotron Rad.* **12** (2005) 537.
- [8] R. Djenadic, G. Akgul, K. Attenkofer, M. Winterer *J. Phys.Chem. C***114** (2010) 9207.

COFFEE

Tuesday afternoon, 27 September, 16:40

Workshops

Tuesday afternoon, 27 September, 17:00

BREAK

Tuesday evening, 27 September, 20:00

List of Participants

Jerzy Antonowicz

antonowi@if.pw.edu.pl

- Warsaw University of Technology, Faculty of Physics
Koszykowa 75, Warszawa 00-662, Poland

Rajmund Bacewicz

bacewicz@if.pw.edu.pl

- Warsaw University of Technology, Faculty of Physics
Koszykowa 75, Warszawa 00-662, Poland

Tomasz Balcer

tomasz.balcer@itme.edu.pl

- Institute of Electronic Materials Technology (ITME)
Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland

Anna Baranowska-Korczyc

akorczyc@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Marcin Bartosik R. Bartosik

marcin.bartosik@uj.edu.pl

- Jagiellonian University (UJ)
Kraków, Poland

Carlo J. Bocchetta

carlo.bocchetta@uj.edu.pl

- Jagiellonian University (UJ)
Kraków, Poland

Marek Brancewicz

brancew@alpha.uwb.edu.pl

- University of Białystok, Institute of Physics
Białystok, Poland

Andrzej Burian

andrzej.burian@us.edu.pl

- University of Silesia, Department of Biophysics and Molecular Physics
Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland

Weizhao Cai

wzhcai@amu.edu.pl

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Bożena Czerny

bcz@camk.edu.pl

- Centrum Astronomiczne im. Mikołaja Kopernika (CAMK)
Bartycka 18, Warszawa 00-716, Poland

Jolanta Darul

jola@amu.edu.pl

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Aleksandra M. Drzewiecka

adrzew@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Elżbieta Dynowska

dynow@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Kamil F. Dziubek

rumianek@amu.edu.pl

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Olga Ermakova

ermak@ifpan.edu.pl

- Instytut Fizyki PAN
Al. Lotnikow 32/46, Warszawa 02668, Poland

Justyna M. Flis

flisjustyna@tlen.pl

- AGH University of Science and Technology (AGH)
al. Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland

Michał J. Gajda

mjgajda@gmail.com

- Max-Planck Institute for Biophysical Chemistry (MPI)
Am Fassberg 11, Goettingen 37077, Germany

Karolina Gąska

kgaska@agh.edu.pl

- AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science (AGH)
Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland

Mirosław Gilski

mirek@amu.edu.pl

- Department of Crystallography, Faculty of Chemistry, A. Mickiewicz University
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland
- Center for Biocrystallographic Research, Institute of Bioorganic Chemistry, PAS
Noskowskiego 12/14, Poznań 61-704, Poland

Paweł Grochulski

Paweł.Grochulski@lightsources.ca

- Canadian Light Source University of Saskatchewan Saskatoon
Canada
Saskatoon S7N0X4, Canada

Elżbieta Guzewicz

guzel@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Łukasz Hawelek

lukasz.hawelek@us.edu.pl

- University of Silesia, August Chelkowski Institute of Physics,
Department of Solid State Physics
Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland
- Instytut Metali Nieżelaznych (IMN)
Sowińskiego 5, Gliwice 44-100, Poland

Adam Jarmuła

adarm@nencki.gov.pl

- Instytut Biologii Doświadczalnej PAN (IBD)
Pasteura 3, Warszawa 02-093, Poland

Mariusz Jaskólski

mariuszj@amu.edu.pl

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Izabela Jendrzewska

izajen@poczta.wp.pl

- University of Silesia, Institute of Chemistry (UŚ)
Szkolna 9, Katowice 40-006, Poland

Dariusz Kajewski

dariusz.kajewski@us.edu.pl

- University of Silesia, Institute of Physics, Department of Physics
of Ferroelectrics
Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland

Zbigniew A. Kaszukur

zkaszukur@ichf.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physical Chemistry
Kasprzaka 44/52, Warszawa 01-224, Poland

Michał D. Kaźmierczak

kaxmierczak@gmail.com

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Wojciech Kida

wk57@wp.pl

- Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Fizyki, Zakład
Fizyki Makromolekularnej (UAM)
Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland

Andrzej Kisiel

andrzej.kisiel@uj.edu.pl

- Jagiellonian University, Institute of Physics (IF UJ)
Reymonta 4, Kraków 30-059, Poland

Marcin T. Klepka

mklepka@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Dorota Klinger

Dorota.Klinger@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Barbara Korczyk

b.korczyk@gmail.com

- WAT, Instytut Optoelektroniki
ul. Kaliskiego 2, Warszawa 00-908, Poland

Iwona A. Kowalik

ikowalik@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Marcin Kowalik

mkowalik@prz.edu.pl

- Rzeszów University of Technology
Rzeszów, Poland
- AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics
and Applied Computer Science (AGH)
Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland

Bogdan J. Kowalski

kowab@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Bogdan J. Kowalski

kowab@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Maciej Kozak

mkozak@amu.edu.pl

- Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Fizyki, Zakład Fizyki Makromolekularnej (UAM)
Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland

Jerzy M. Kubacki

jerzy.kubacki@us.edu.pl

- University of Silesia, August Chełkowski Institute of Physics, Department of Solid State Physics
Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland

Monika U. Kwaśniak-Kominek

monika.kwasniak@gmail.com

- AGH University of Science and Technology (AGH)
al. Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland

Wojciech M. Kwiatek

wojciech.kwiatek@ifj.edu.pl

- Institut of Nuclear Physics Polish Academy of Science (IFJPAN)
Radzikowskieg 152, Kraków 31-342, Poland

Krystyna Lawniczak-Jablonska

jablo@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Maria Lefeld-Sosnowska

lefeld@fuw.edu.pl

- Warsaw University, Institute of Experimental Physics (IEP UW)
Hoża 69, Warszawa 00-681, Poland

Joanna Libera

jlibera@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Małgorzata I. Łukasiewicz

mluk@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Agnieszka Malinowska

malinows@if.pw.edu.pl

- Institute of Electronic Materials Technology (ITME)
Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland
- Warsaw University of Technology, Faculty of Physics
Koszykowa 75, Warszawa 00-662, Poland

Maciej Manecki

gpmmanec@cyfronet.krakow.pl

- AGH Faculty of Geology, Geophysics and Environmental Protection (AGH-UST)
al. Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland

Krystyna J. Mazur

Krystyna.Mazur@itme.edu.pl

- Institute of Electronic Materials Technology (ITME)
Warszawa 01919, Poland

Bogusław Mierzwa

bmierzwa@ichf.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physical Chemistry
Kasprzaka 44/52, Warszawa 01-224, Poland

Magdalena Murawska

madziamur@gmail.com

- Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Fizyki, Zakład Fizyki Makromolekularnej (UAM)
Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland

Jakub K. Nowak

nowakj@kul.pl

- The John Paul II Catholic University, Department of Chemistry (JPPII-KUL)
al. Raclawickie 14, Lublin 20-950, Poland

Bronisław A. Orlowski

orbro@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland
- SZPITAL WOJEWÓDZKI W BĘŁCHATOWIE
Poziomkowa 5, Bęłchatów 97-400, Poland

Kinga Ostrowska

kinga.ostrowska@poczta.fm

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Damian K. Paliwoda

damian.paliwoda@gmail.com

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Wojciech Paszkowicz

paszk@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Ewa M. Patyk

ewap.1988@gmail.com

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Jerzy B. Pelka

pelkay@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Roman Pielaszek

roman@pielaszek.net

- Pielaszek Research (PR)
Popiołów 10a, Warszawa 04-847, Poland

Anna Pietnoczka

pietnoczka@if.pw.edu.pl

- Warsaw University of Technology, Faculty of Physics
Koszykowa 75, Warszawa 00-662, Poland

Zuzanna Pietralik

zuzannap@amu.edu.pl

- Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Fizyki, Zakład Fizyki Makromolekularnej (UAM)
Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland

Michał M. Pilch

michal.pilch@us.edu.pl

- University of Silesia, August Chełkowski Institute of Physics, Department of Solid State Physics
Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland

Paweł Piszora

pawel@amu.edu.pl

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Radosław Przeniosło

radek.przenioslo@fuw.edu.pl

- Warsaw University, Institute of Experimental Physics (IEP UW)
Hoża 69, Warszawa 00-681, Poland

Anna Reszka

reszka@ifpan.edu.pl

- Instytut Fizyki PAN
Al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Przemysław Romanowski

romeck@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Iwona Sankowska

isanko@ite.waw.pl

- Institute of Electron Technology
Al. Lotników 32/46, Warsaw 02-668, Poland

Jan Sędzik

sedzik@kth.se

- Royal Institute of Technology, Department of Chemical Engineering and Technology (KTH)
Teknikringen 28, Stockholm SE10044, Sweden

Paulina Seremak-Peczakis

seremak@agh.edu.pl

- AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics and Applied Computer Science (AGH)
Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland

Artem Shalimov

shalim@ifpan.edu.pl

- ROBL-CRG at the ESRF
B.P. 220, Grenoble F-38043, France

Magdalena Sikora

magdalena.mansfeld@tlen.pl

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Marcin Sikora

marcin.sikora@agh.edu.pl

- AGH University of Science and Technology (AGH)
al. Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland

Wojciech A. Sławiński

wojciech@fuw.edu.pl

- University of Warsaw, Institute of Experimental Physics (IFDUW)
Hoża 69, Warsaw 00-681, Poland

Ryszard Sobierajski

sobieraj@ifpan.edu.pl

- Instytut Fizyki PAN
Al. Lotników 32/46, Warszawa 02668, Poland

Marek J. Stankiewicz

m.j.stankiewicz@uj.edu.pl

- Jagiellonian University (UJ)
Kraków, Poland

Jacek Szade

jacek.szade@us.edu.pl

- University of Silesia, August Chelkowski Institute of Physics, Department of Solid State Physics
Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland

Wojciech Szuszkiewicz

szusz@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Michał Taube

mtaube@amu.edu.pl

- Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Fizyki, Zakład Fizyki Makromolekularnej (UAM)
Umultowska 85, Poznań 61-614, Poland

Brian H. Toby

bhtoby@comcast.net

- Argonne National Laboratory, Advanced Photon Source
Argonne, IL 60439, United States

Ewa M. Trzetrzezińska

trzetrze@ichf.edu.pl

- Polish Academy of Science, Institute of Physical Chemistry (PAN-ICHP)
Kasprzaka 44/52, Warsaw 01-224, Poland

Kazimierz Turzyniecki

katur@message.pl

- Kolegium KSW
Warszawa 02-946, Poland

Łukasz Wachnicki

lwachn@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Dariusz Wardecki

dward@fuw.edu.pl

- Instytut Fizyki Doświadczalnej, Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski
Hoża 69, Warszawa 00-681, Poland

Łukasz Węgrzyński

mrc.vcr@gmail.com

- Military University of Technology (MUT)
Kaliskiego, Warsaw 00-908, Poland

Aleksandra Wierzbicka

czyzak@ifpan.edu.pl

- Instytut Fizyki PAN
Al. Lotników 32/46, Warszawa 02668, Poland

Edyta Wierzbicka

eolsz@fuw.edu.pl

- Institute of Electronic Materials Technology (ITME)
Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland

Wojciech Wierzchowski

wierzc_w@sp.itme.edu.pl

- Institute of Electronic Materials Technology (ITME)
Wólczyńska 133, Warszawa 01-919, Poland

Piotr Wilk

p.wilk@nencki.gov.pl

- Instytut Biologii Doświadczalnej PAN (IBD)
Pasteura 3, Warszawa 02-093, Poland

Bartłomiej S. Witkowski

bwitkow@ifpan.edu.pl

- Institute of Physics, Polish Academy of Sciences
Warsaw 02-668, Poland

Marcin Wojtyniak

mwojtyniak@us.edu.pl

- University of Silesia, Institute of Physics
Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland

Anna Wolska

wolska@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Katarzyna Wolska

wolska@agh.edu.pl

- AGH University of Science and Technology, Faculty of Physics
and Applied Computer Science (AGH)
Mickiewicza 30, Kraków 30-059, Poland

Grzegorz Wrochna

Grzegorz.Wrochna@fuw.edu.pl

- The Andrzej Soltan Institute for Nuclear Studies (IPJ)
Otwock-Świerk 05-400, Poland

Tetyana Zayarnyuk

zayar@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Witold Zieliński

witar6@poczta.onet.pl

- Adam Mickiewicz University, Faculty of Chemistry
Grunwaldzka 6, Poznań 60-780, Poland

Danuta Zymierska

zymier@ifpan.edu.pl

- Polish Academy of Sciences, Institute of Physics
al. Lotników 32/46, Warszawa 02-668, Poland

Index

A

Adamek, Dariusz, 45
Almyras, George A., 33
Andrejczuk, Andrzej, 11
Antonowicz, Jerzy, 25, 33
Arvanitis, Dimitri, 42

B

Bacewicz, Rajmund, 25
Baecht, Carsten, 25, 35
Baker, David, 7
Bak-Misiuk, Jadwiga, 20, 29
Balcer, Tomasz, 17, 46, 47
Baranowska-Korczyc, Anna, 11, 21
Bartnik, Andrzej, 37, 39
Bell, Anthony, 30
Berkowski, Marek, 14
Bocchetta, Carlo J., 10
Bonanni, Alberta, 42
Borany, Johannes V., 35
Borysiewicz, Michał A., 19
Brancewicz, Marek, 11
Bródka, Aleksander, 9
Bukowski, Mirko, 43
Burian, Andrzej, 9
Burian, Tomas, 17

C

Caliebe, Wolfgang, 12, 29
Carlson, Stefan, 14, 38
Cerenius, Yngve, 14, 38
Chalupsky, Jaroslav, 17
Cooper, Seth, 7
Czerny, Bożena, 7
Czyżycki, Mateusz, 45

D

Dabkowska, Hanna, 15
Darul, Jolanta, 12, 38
Dietl, Tomasz, 42
DiMaio, Frank, 7
Dittmann, Regina, 47
Dobrzyński, Ludwik, 11
Domagala, Jaroslaw, 12, 31, 50
Dore, John C., 9
Dowierciał, Anna, 39
Drobiazg, Tomasz, 33
Drube, Wolfgang, 23
Drzewiecka, Aleksandra M., 49
Dybko, Krzysztof, 11
Dynowska, Elżbieta, 12, 19, 20, 29, 30
Dziawa, Piotr, 23
Dłużewski, Piotr, 11

E

Elbaum, Danek, 11, 21
Ermakova, Olga, 14, 15
Evangelakis, Giorgos A., 33

F

Fidelus, Janusz D., 14
Fiedorowicz, Henryk, 37, 39
Fitch, Andy, 43
Fodje, Michel N., 8
Fronc, Krzysztof, 11, 21

G

Gaudin, Jerome, 17
George, Graham, 8
Gierałtowska, Sylwia, 28
Gierlotka, Stanisław, 14
Gilski, Mirosław, 7, 40
Glatzel, Pieter, 48
Gleeson, Anthony J., 17
Godlewski, Marek, 16, 28, 32, 51
Goryl, Piotr, 10
Grenzer, Joerg, 35
Grochulski, Paweł, 8
Guziewicz, Elżbieta, 16, 28, 32, 51

H

Hajkova, Wiera, 17
Hawełek, Łukasz, 9
Hempelmann, Rolf, 43
Honkimaki, Veijo, 9

J

Janik, Elżbieta, 12
Jarmołowski, Artur, 36
Jarmuła, Adam, 39
Jasik, Agata, 50
Jaskólski, Mariusz, 7
Johnson, Robert L., 28
Juha, Libor, 17

K

Kajewski, Dariusz, 47
Kamińska, Izabela, 11
Kazmierczyk, Maciej, 7
Khatib, Firas, 7
Kida, Wojciech, 37
Kierdaszuk, Borys, 39
Klepka, Marcin T., 19, 20, 21, 32, 49, 51
Klinger, Dorota, 17, 46
Klosek, Kamil, 45
Knapp, Michael, 25
Köhl, Annemarie, 47
Kopalko, Krzysztof, 16
Korczyc, Barbara, 37
Kościewicz, Kinga, 47

Kowalik, Iwona A., 42
Kowalik, Marcin, 18
Kowalski, Bogdan J., 11, 23, 28, 34
Kozak, Maciej, 26, 26, 27, 36, 36, 37
Kozioł, Anna E., 49
Kołodziejczyk, Andrzej, 18
Królas, Krzysztof, 10
Krzywda, Szymon, 7
Kubacki, Jerzy M., 47
Kuczumow, Andrzej, 22
Kłopotowski, Łukasz, 11

L

Lankosz, Marek, 45
Lathe, Christian, 15, 38
Lawniczak-Jablonska, Krystyna, 19, 20, 21
Lefeld-Sosnowska, Maria, 21, 35
Lenser, Christian, 47
Libera, Joanna, 21
Locatelli, Andrea, 42
Luebbert, Daniel, 31
Lusakowska, Elżbieta, 17, 45
Łukasiewicz, Małgorzata I., 16, 32, 51
Łukasiewicz, Tadeusz, 21, 35

M

Malinowska, Agnieszka, 21, 35
Marone, Federica, 22
Mazur, Krystyna J., 47
Menteş, Tefvik Onur, 42
Mickevicius, Sigitas, 23
Minikayev, Roman, 14, 15, 25, 30
Misiuk, Andrzej, 29
Murawska, Magdalena, 36
Młynarczyk, Michał, 10

N

Nietubyc, Robert, 34
Niño, Miguel A., 42
Nowak, Jakub K., 22
Nowicki, Waldemar, 38

O

Orlowski, Bronislaw A., 23, 28

P

Papageorgiou, Dimitris G., 33
Paszkowicz, Wojciech, 11, 14, 15, 25
Paulmann, Carsten, 21, 35, 46, 47
Pawlak, Dorota A., 21
Pelka, Jerzy, 17, 23, 46
Pelka, Jerzy B., 8
Pichova, Iva, 7
Pieńkowska, Joanna, 36
Pietnoczka, Anna, 25, 33
Pietralik, Zuzanna, 26, 26, 27
Piszora, Paweł, 14, 25, 38

Popovic, Zoran, 7
Przeniosło, Radosław, 43
Pylak, Maciej, 11

R

Radwańska, Edyta, 45
Regiński, Kazimierz, 50
Reszka, Anna, 11, 23, 28
Rode, Wojciech, 39
Romanowski, Przemysław, 12, 20, 29
Rypniewski, Wojciech, 39

S

Sadowski, Janusz, 20, 29, 34
Sankowska, Iwona, 50
Sarzynski, Marcin, 31
Schulte, Karina, 47
Sędzik, Jan, 42
Seeck, Oliver H., 50
Shalimov, Artem, 35
Sikora, Bożena, 11
Sikora, Marcin, 48
Skrzypczak, Andrzej, 27
Ślupinski, Tomasz, 25
Sobanska, Marta, 45
Sobczak, Kamil, 11
Sobierajski, Ryszard, 17, 42, 46
Stankiewicz, Marek J., 10
Story, Tomasz, 30
Strupinski, Wlodek, 47
Swirkowicz, Marek A., 35
Szade, Jacek, 47
Szczerbakow, Andrzej, 30
Szczerbowska-Boruchowska, Magdalena, 45
Szuszkiewicz, Wojciech, 30

T

Taube, Michał, 36
Thiess, Sebastian, 23
Tiedtke, Karl, 17
Tokarz, Waldemar, 18
Toleikis, Sven, 17
Tomita, Satoshi, 9
Tracz, Piotr, 10
Trots, Dmytro M., 30
Turczynski, Sebastian, 21
Turzyniecki, Kazimierz, 31

W

Wabnitz, Hubertus, 17
Wachnicki, Łukasz, 16, 28
Walczak, Łukasz, 10
Wandzilak, Aleksandra, 45
Wardecki, Dariusz, 43
Waser, Rainer, 47
Wawrzyniak, Adriana, 10
Węgrzyński, Łukasz, 39

Wei, Su-Huai, 25
Werner-Malento, Ewa, 14
Wieczorek, Daria, 26
Wierzbicka, Aleksandra, 31, 45
Wierzbicka, Edyta, 35
Wierzchowski, Wojciech, 17, 21, 35, 46, 47
Wieteska, Krzysztof, 17, 21, 35, 46, 47
Wilk, Piotr, 39
Witkowski, Bartłomiej S., 32, 51
Wojnar, Piotr, 12
Wojtyniak, Marcin, 47
Wolska, Anna, 19, 20, 21, 32, 41, 49, 51
Wolska, Katarzyna, 45
Wróbel, Paweł, 45
Wrochna, Grzegorz, 10

Y

Yefanov, Oleksandr, 50

Z

Zabranska, Helena, 7
Zalecki, Ryszard, 18
Zieliński, Ryszard, 26
Żukowski, Eugeniusz, 11
Zymierska, Danuta, 17
Zymirska, Danuta, 46
Zytkiewicz, Zbigniew R., 31, 45

SYNCHROTRON LIGHT NEWS

WORTH READING

Can ZnO doped by transition metal be ferromagnetic? (January 2010). Scientists from US and France proved by using synchrotron-based spectroscopy that as long as phase separation or excessive defect formation is absent, Co:ZnO is paramagnetic. They established quantitative thresholds based on four reliable quality indicators using XAS; samples that show ferromagnet-like behavior fail to meet these quality indicators, and complementary experimental techniques indeed prove phase separation. Careful analysis of XAS spectra is shown to provide quantitative information on the presence and type of dilute secondary phases in a highly sensitive, non-destructive manner. XAS and XMCD spectra were collected at the ID12 beamline of European Synchrotron Radiation Facility (ESRF).

A. Ney, M. Opel, T. C. Kaspar, V. Ney, S. Ye, K. Ollefs, T. Kammermeier, S. Bauer, K.-W. Nielsen, S.T.B. Goennenwein, M.H. Engelhard, S. Zhou, K. Potzger, J. Simon, W. Mader, S.M. Heald, J.C. Cezar, F. Wilhelm, A. Rogalev, R. Gross, S.A. Chambers, "Advanced spectroscopic synchrotron techniques to unravel the intrinsic properties of dilute magnetic oxides: the case of Co:ZnO," *New J. Phys.* 12 (2010) 013020-1-16. (KLJ)

Complex nature of wood determined by tomographic techniques (January 2010). The structure of various wood samples has been studied at SLS (Switzerland) by a group of Swiss scientists. The tomographic microscopy is found to be helpful in understanding the wood features at the length scale of several microns.

D. Mannes, F. Marone, E. Lehmann, M. Stampanoni, P. Niemz, "Application areas of synchrotron radiation tomographic microscopy for wood research," *Wood Sci. Technol.* 44 (2010) 67-84. (WP)

High-pressure EXAFS study of GeO₂ (January 2010). An international team from US, France and Italy performed high-pressure EXAFS measurements on amorphous GeO₂ over increasing and decreasing pressure cycles, at pressure up to 44 GPa. The results shed light on the GeO₂ densification process and on the nature of the amorphous-amorphous transition, suggesting that the transition is more gradual and continuous than what has been previously reported. X-ray absorption spectra were collected at the ID24 dispersive-EXAFS beamline of European Synchrotron Radiation Facility (ESRF).

M. Baldini, G. Aquilanti, H.-K. Mao, W. Yang, G. Shen, S. Pascarelli, W.L. Mao, "High-pressure EXAFS study of vitreous GeO₂ up to 44 GPa," *Phys. Rev. B* 81 (2010) 024201-1-6. (KLJ)

Intrinsic properties of Co:ZnO unraveled by X-ray absorption spectroscopy (January 2010). Advanced synchrotron-based XAS at the Co K-edge performed by a team of American and German scientists provides a direct and sensitive probe of specimen quality and in this way can substantiate or refute claims of intrinsic magnetism in Co:ZnO. The authors show that specimens which meet the quality thresholds are devoid of secondary phases and then Co:ZnO films are paramagnetic. When changes in the preparation conditions promote the phase separations, then superparamagnetic behavior is observed. Utilizing XAS to relate magnetic properties with phase purity is a powerful

approach that can be used to other doped materials. The studies were performed at the ESRF beamline ID12 (Grenoble, France).

A. Ney, M. Opel, T.C. Kaspar, V. Ney, S. Ye, K. Ollefs, T. Kammermeier, S. Bauer, K.-W. Nielsen, S.T.B. Goennenwein, M.H. Engelhard, S. Zhou, K. Potzger, J. Simon, W. Mader, S.M. Heald, J.C. Cezar, F. Wilhelm, A. Rogalev, R. Gross, S.A. Chambers, "Advances spectroscopic synchrotron techniques to unravel the intrinsic properties of dilute magnetic oxides: The case of Co:ZnO," *New J. Phys.* 12 (2010) 013020-1-16. (EG)

Mechanism of Mo/Si multilayer damage (January 2010).

A multinational team of scientists from The Netherlands, Poland, Czech Republic, Germany, USA and UK has experimentally determined the process of damaging the multilayer optical elements during a single shot of the FLASH free electron laser (DESY, Hamburg, Germany).

A.R. Khorsand *et al.*, "Single shot damage mechanism of Mo/Si multilayer optics under intense pulsed XUV exposure," *Optics Express* 18 (2010) 700-712. (WP)

Usefulness of X-ray absorption spectroscopy in art conservation (January 2010).

The cultural heritage community commonly uses SR-XRF and SR-XRD, whereas the use of synchrotron-based X-ray absorption spectroscopy (SR-XAS) techniques remains marginal, mostly because cultural heritage specialists rarely interact with SR physicists. An international team (affiliations in France, Belgium and The Netherlands) examined the basic principles and capabilities of XAS techniques in art preservation. They emphasized, in particular, the chemical mapping capability of this technique, with high spatial resolution that provides information about local composition and chemical states, even for trace elements.

M. Cotte, J. Susini, J. Dik, K. Janssens, "Synchrotron-based X-ray absorption spectroscopy for art conservation: Looking back and looking forward," *Acc. Chem. Res.* 43 (2010) 705-714. (KLJ)

3D version of Medipix detector tested at DIAMOND light source (February 2010).

The construction and results of tests (at the Diamond Light Source, UK) are presented for a new type of X-ray semiconductor area detector in a paper by a team of scientists affiliated in UK and Spain. The term "3D" concerns a column-like architecture of p-n diodes in a silicon sensor chip, which is connected to a Medipix2 readout chip. Its main advantage consists in low charge sharing between adjacent pixels.

D. Pennicard, J. Marchal, C. Fleta, G. Pellegrini, M. Lozano, C. Parkes, N. Tartoni, D. Barnett, I. Dolbnya, I. Sawhney, R. Bates, V. O'Shea, V. Wright, "Synchrotron tests of a 3D Medipix2 X-ray detector," *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 57 (2010) 387-394. (AZ)

In-situ synchrotron study of green rust sulfate formation (February 2010).

"Green rust", is a complex iron hydroxide with physicochemical characteristics making it a material applicable in the domain of the pollution prevention and environmental waste treatment technologies, as it can be intercalated with various types of anions. Sulfate-ions-containing green rust is an important product of aqueous steel corrosion. A group of British scientists has applied X-ray scattering (WAXS) to experimentally determine the way of

formation of the green rust sulfate. Its complex formation path was studied using a computer-controlled chemical reactor mounted at the beamline. The knowledge of mechanism of green rust sulfate formation are of interest for understanding of the corrosion processes and provides key parameters that can tailor the production of green rust sulfate for industrial applications. The experiments were performed at MWP6.2 station of the Synchrotron Radiation Source (Daresbury Laboratory, U.K.) and at I22 station of Diamond Light Source (Oxford, U.K.).

I.A.M. Ahmed, L.G. Benning, G. Kakonyi, A.D. Sumoondur, N.J. Terrill, S. Shaw, "Formation of green rust sulfate: A combined *in situ* time-resolved X-ray scattering and electrochemical study," *Langmuir* 26 (2010) 6593-6603. (PP)

Monitoring nitride layer growth (February 2010). Real-time X-ray reciprocal space mapping was used by an American team to study the strain and composition distribution during metal-organic chemical vapor deposition of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ on GaN. Authors demonstrate an interesting case of application of synchrotron radiation: they monitor the growth process through collecting a series of reciprocal space maps. In this way of *in-situ* observation of the process, the authors determined the progression of composition/strain inhomogeneity formation. The study was performed at the Advanced Photon Source (Argonne, USA).

M.-I. Richard, M.J. Highland, T.T. Fister, A. Munkholm, J. Mei, S.K. Streiffer, C. Thompson, P.H. Fuoss, G.B. Stephenson, "In-situ synchrotron x-ray studies of strain and composition evolution during metal-organic chemical vapor deposition of InGaIn ," *Appl. Phys. Lett.* 96 (2010) 051911-1-3. (AW)

Strain determination on wood exposed to bending (February 2010). Researchers from Sweden and Switzerland determined the deformation of wood in the microscale. Three-point bending was applied to millimeter-sized samples under various loads. Cellular structure and strain field were determined for the applied loads. A nonelastic strain component was identified in the vicinity of the contact points. The experiments were performed at the Swiss Light Source (Villigen, Switzerland).

F. Forsberg, M. Sjö Dahl, R. Mooser, "Full three-dimensional strain measurements on wood exposed to three-point bending: analysis by use of digital volume correlation applied to synchrotron radiation micro-computed tomography image data," *Strain* 46 (2010) 47-60. (WP)

Dental implant analysis using synchrotron high-resolution radiography (March 2010). Micro-mechanical properties of dental implants strongly influence their durability. Scientists from Germany have determined fine details of implant-abutment interface of two-piece dental implants. Imaging of the mating zone of the implants during loading allowed for observation of the micro-gap formed between the two implant components. X-ray imaging experiments were carried out using a high energy beam (50 keV) at the BAMline of the BESSY-II synchrotron (Berlin, Germany).

A. Rack, T. Rack, M. Stiller, H. Riesemeier, S. Zabler, K. Nelson, "In vitro synchrotron-based radiography of micro-gap formation at the implant-abutment interface of two-piece dental implants," *J. Synchrotr. Radiat.* 17 (2010) 289-294. (WP)

Single-pulse resonant magnetic scattering at FLASH (March 2010). A collaboration between several institutes from Germany (from Hamburg, Berlin, Karlsruhe, Heidelberg and Remagen)) resulted in demonstration of feasibility of the single-pulse resonant magnetic scattering experiments. The soft X-ray pulses used were generated by the FLASH FEL in Hamburg and a magnetic diffraction pattern from a Co/Pt multilayer sample at the $\text{Co } M_{2,3}$ edge was recorded and analyzed.

C. Gutt, S. Streit-Nierobisch, L.-M. Stadler, B. Pfau, C. M. Günther, R. Könnicke, R. Frömter, A. Kobs, D. Stickler, H.P. Oepen, R.R. Fäustlin, R. Treusch, J. Feldhaus, E. Weckert, I.A. Vartanyants, M. Grunze, A. Rosenhahn, T. Wilhein, S. Eisebitt, G. Grübel, "Single-pulse resonant magnetic scattering using a soft x-ray free-electron laser," *Phys. Rev. B* 81 (2010) 100401-1-4. (WP)

Soft X-ray diffraction under free-electron laser radiation demonstrated (March 2010). A team of scientists affiliated in Germany has demonstrated the opportunity of investigation of soft X-ray (8 nm wavelength) diffraction in a single-shot mode (CFEL facility, Hamburg) for silver behenate nanocrystals exhibiting a lattice spacing of 5.8 nm.

I. Rajkovic, G. Busse, J. Hallmann, R. Moré, M. Petri, W. Quevedo, F. Krasniqi, A. Rudenko, T. Tschentscher, N. Stojanovic, S. Düsterer, R. Treusch, M. Tolkiehn, S. Techert, "Diffraction properties of periodic lattices under free electron laser radiation", *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010) 125503-1-4. (WP)

Mg_2FeH_6 —synthesis and decomposition (April 2010). Synthesis and decomposition of Mg_2FeH_6 , a potential hydrogen-storage material were studied using X-ray diffraction at the MAX-lab synchrotron laboratory by a team of scientists from Poland, Sweden and Denmark. Formation of the title compound is found to consist of two steps.

M. Polanski, T.K. Nielsen, Y. Cerenius, J. Bystrzycki, T.R. Jensen, "Synthesis and decomposition mechanisms of Mg_2FeH_6 studied by *in-situ* synchrotron X-ray diffraction and high-pressure DSC," *Int. J. Hydrogen Energy* 35 (2010) 3578-3582. (WP)

New hydrogen storage materials – Ti-V-Cr alloy (April 2010). Scientists from China show, using X-ray absorption spectroscopy and small-angle X-ray scattering synchrotron radiation based techniques, how local atomic order around Ti and V atoms changes after Ti-V-Cr. SAXS experiment indicated that nanoparticles' size increases after hydrogenation. The study has been performed at the Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF) (Beijing, China).

C. Wan, X. Ju, Y. Qi, Y. Xin, J. Qiu, S. Wang, X. Liu, L. Jiang, "Synchrotron EXAFS and XRD studies of Ti-V-Cr hydrogen absorbing alloy," *Int. J. Hydrogen Energy* 35 (2010) 2915-2920. (MTK)

Synchrotron X-ray diffraction supported by spectroscopic techniques reveals the pigments composition of Pompeian wall paintings (April & May 2010). Scientists from France and Spain have determined the nature of pigments used in Pompeian-wall paintings. Using high-resolution powder diffraction at a synchrotron beamline allowed for identification of pigment components of weight as low as several micrograms. Numerous phases have been identified and evidences for the use of organic binders have been demonstrated. The synchrotron diffraction technique is destructive at the microgram level but it is demonstrated to be more sensitive to minority phases. BM25A beamline (ESRF,

Grenoble, France) was used in the present study for diffraction data collection.

A. Duran, M.C. Jimenez De Haro, J.L. Perez-Rodriguez, M.L. Franquelo, L.K. Herrera, A. Justo, "Determination of pigments and binders in Pompeian wall paintings using synchrotron radiation – high-resolution x-ray powder diffraction and conventional spectroscopy – chromatography," *Archaeometry* 52 (April 2010) 286–307; A. Duran, J. Castaing, P. Walter, "X-ray diffraction studies of Pompeian wall paintings using synchrotron radiation and dedicated laboratory made systems," *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.* 99 (May 2010) 333–340. (WP)

Chemistry of *Archaeopteryx* (May 2010). A collaboration between American and British scientists resulted in the first detailed chemical analysis of *Archaeopteryx* (*Thermopolis Archaeopteryx*). The technique termed synchrotron rapid scanning X-ray fluorescence (SRS-XRF) developed at the Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL) was used. It permits to rapidly scan the given (large) object and determine, at each point, the content of trace elements at concentration levels of parts per million. Distribution of the bone and feather elements has been determined in detail and analyzed. SRS-XRF imaging is concluded to be a powerful development in the geological and biological sciences.

U. Bergmann, R.W. Morton, P.L. Manning, W.I. Sellers, S. Farrar, K.G. Huntley, R.A. Wogelius, P. Larson, "Archaeopteryx feathers and bone chemistry fully revealed via synchrotron imaging," *PNAS* 107 (2010) 9060–9065. (WP)

Highest-quality X-ray mirrors for synchrotron applications (May 2010). Scientists from Germany in collaboration with Carl Zeiss Laser Optics GmbH implemented powerful measuring and manufacturing techniques for the generation of highest quality optical components for synchrotron radiation applications, especially those of conical sections geometries used for collimation or focusing.

H. Thiess, H. Lasser, F. Siewert, "Fabrication of X-ray mirrors for synchrotron applications," *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* 616 (2010) 157–161. (RS)

New synchrotron laboratory for micro and nano devices (May 2010). The authors discuss the overall beamline concept of SyLMAND, the Synchrotron Laboratory for Micro and Nano Devices at the Canadian Light Source storage ring (Saskatoon, Canada). SyLMAND is a new deep X-ray lithography facility focusing on spectral and beam power adjustability and large exposable area formats. The beam power can be adjusted between 0.1 and 261 W, while photon energies between 1 and 15 keV can be achieved. The facility is currently getting finished. It will add unique spectral and beam power capabilities at large exposure formats to the scientific community.

S. Achenbach, V. Subramanian, D. Klymyshyn, G. Wells, "Synchrotron laboratory for micro- and nanodevices: Facility concept and design," *Microsyst. Technol.* 16 (2010) 1293–1298. (EG)

Synchrotron-based FTIR spectra of stained single cells: Towards a clinical application in pathology (May 2010). Authors from UK, Norway and France have shown the use of FTIR spectroscopy at SOLEIL synchrotron facility (Saint-Aubin, France) as a potential analytical method in tissue and

cell studies aimed for cancer diagnosis. Their findings open a way towards clinical applications of FTIR such as a tool that would scan samples to assess the presence or absence of malignant cells in biopsies, or as an aid to help pathologists to better characterize those cells that are suspicious but not diagnostic for cancer. These revolutionary applications are described in a highly ranked *Laboratory Investigation* journal. J. Pijanka, G.D. Sockalingum, A. Kohler, Y. Yang, F. Draux, G. Parkes, K.-P. Lam, D. Collins, P. Dumas, C. Sandt, D.G. van Pittius, G. Douce, M. Manfait, V. Untereiner, J. Sulé-Suso, Models and techniques synchrotron-based FTIR spectra of stained single cells. Towards a clinical application in pathology, *Lab. Investig.* 90 (2010) 797–807. (WMK)

The structure of D-ribose solved (May 2010). The structure of crystalline D-ribose has remained unknown up until now. With its 20 main scattering centers in the asymmetric unit, solving the D-ribose crystal structure represents a challenge for powder diffraction methods. Scientists from Switzerland and Germany solved the crystal structure of D-ribose using synchrotron powder diffraction (data collected at Materials Science Beamline at the Swiss Light Source, Villigen, Switzerland) combined with nuclear magnetic resonance.

D. Šišak, L.B. McCusker, G. Zandomenighi, B.H. Meier, D. Bläser, R. Boese, W.B. Schweizer, R. Gilmour, J.D. Dunitz "The crystal structure of D-Ribose—at last!," *Angew. Chem. Int. Ed.* 49 (2010) 4503–4505. (PP)

XRD and XAS monitoring of batteries during operation (May 2010). Scientists from France designed a new electrochemical special cell for *operando* experiments for X-ray diffraction and X-ray absorption at synchrotron facilities. It allows for the investigation of insertion materials under high current densities (up to 5C rate) and hence to study complex phenomena of structural and electronic changes out of equilibrium. The $\text{LiFePO}_4\text{--FePO}_4$ system was chosen as a case study to validate this cell. In particular, for this system the phenomenon of apparent delays in phase formation compared with the number of electrons exchanged, was reported. The studies were performed at the synchrotron SOLEIL, France.

J.B. Leriche, S. Hamelet, J. Shu, M. Morcrette, C. Masquelier, G. Ouvrard, M. Zerrouki, P. Soudan, S. Belin, E. Elkaïm, F. Baudalet, "An electrochemical cell for *operando* study of lithium batteries using synchrotron radiation," *J. Electrochem. Soc.* 157 (2010) A606–A610. (KLJ)

Elastic deformation of dentin (June 2010). Dentin has a complex microstructure: it is built from hydroxyapatite nanoplatelets within a compliant collagen matrix. Its elastic properties depend on the distribution and size of the platelets. The Young modulus of the dentine is found to be much lower than that of the bulk hydroxyapatite. The study was carried out at the 2-BM beamline of the Advanced Photon Source (APS), Argonne, USA.

A.C. Deymier-Black, J.D. Almer, S.R. Stock, D.R. Haefner, D.C. Dunand, "Synchrotron X-ray diffraction study of load partitioning during elastic deformation of bovine dentin," *Acta Biomaterialia* 6 (2010) 2172–2180. (WP)

Synchrotron at the service of analytical chemistry (June 2010). A legendary racehorse, Phar Lap, died of arsenic poisoning in 1932. The researchers from Australia and

Taiwan confirm that the animal died of arsenic poisoning. They only examined hairs that were unquestionably still growing at the time of death. These were individually analyzed along their entire length with synchrotron X-ray fluorescence spectroscopy, at the Advanced Photon Source (Argonne, US).

I.M. Kempson, D.A. Henry "Determination of arsenic poisoning and metabolism in hair by synchrotron radiation: The case of Phar Lap," *Angew. Chem. Int. Ed.* 49 (2010) 4237-4240. (PP)

A synchrotron study shows that washing rice removes the trace toxic elements (July 2010). A team of scientists from Hungary, Belgium and China has used synchrotron radiation (DORIS III synchrotron ring, HASYLAB DESY, Hamburg, Germany) to determine the heavy metal content in rice and discussed the ways of removing these metals from the food. The results show that attention has to be paid for the preparation of rice dishes in a specific way may strongly reduce the amount of toxic elements such as arsenic and cadmium concentrating in the near-surface region.

V.G. Mihucz, G. Silversmit, I. Szalóki, B. de Samber, T. Schoonjans, E. Tatár, L. Vincze, I. Virág, J. Yao, G. Záray, "Removal of some elements from washed and cooked rice studied by inductively coupled plasma mass spectrometry and synchrotron based confocal micro-X-ray fluorescence," *Food Chem.* 121 (2010) 290-297. (WP)

Tumor cell response to synchrotron microbeam radiation therapy differs markedly from cells in normal tissues (July 2010). Scientists from Australia describe the use of high-dose synchrotron radiation (SR) for microbeam radiation therapy (MRT). They claim the high-dose SR can be effective at destroying tumors in animal models while causing very little damage to normal tissues. Their observations seem to be very important in terms of potential clinical application.

J.C. Crosbie, R.L. Anderson, K. Rothkamm, C.M. Restall, L. Cann, S. Ruwanpura, S. Meachem, N. Yagi, I. Svalbe, R.A. Lewis, B.R.G. Williams, P.A.W. Rogers, "Tumor cell response to synchrotron microbeam radiation therapy differs markedly from cells in normal tissues," *Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys.* 77 (2010) 886-894. (WMK)

X-ray free electron laser operating at wavelengths down to 1.2 Å (August 2010). A large American group (from Stanford, Livermore and Argonne) has reported lasing and operation at a XFEL in the SLAC National Accelerator Laboratory. The pulse duration achieved was less than 10 fs.

P. Emma, R. Akre, J. Arthur, R. Bionta, C. Bostedt, J. Bozek, A. Brachmann, P. Bucksbaum, R. Coffee, F.-J. Decker, Y. Ding, D. Dowell, S. Edstrom, A. Fisher, J. Frisch, S. Gilevich, J. Hastings, G. Hays, Ph. Hering, Z. Huang, R. Iverson, H. Loos, M. Messerschmidt, A. Miahnahri, S. Moeller, H.-D. Nuhn, G. Pile, D. Ratner, J. Rzepiela, D. Schultz, T. Smith, P. Stefan, H. Tompkins, J. Turner, J. Welch, W. White, J. Wu, G. Yocky, J. Galayda, "First lasing and operation of an ångström-wavelength free-electron laser," *Nature Photonics* 4 (2010) 641-647. (WP)

EXAFS in core/shell-nanoparticles studies (September 2010). Scientists from UK demonstrate that EXAFS is useful for studies of the atomic structure in core/shell nanoparticles, on the example of Fe/Cu and Fe/Au core/shell nanoparticles. It was clear from the Fe/Cu results that if the purpose (or one of the purposes) of the shell is to affect a change in the atomic structure of the core, to obtain higher atomic moments for

example, the shell should be thick enough to achieve this. Both the Fe/Cu and the Fe/Au results show that in thin shells, 1–2 monolayers thick, there is a considerable contraction in the interatomic distances compared with those in the corresponding bulk materials. The measurements were performed on at the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) at Grenoble and at DIAMOND Light Source (UK).

S.H. Baker, M. Roy, S.C. Thornton, M. Qureshi, C. Binns, "Probing atomic structure in magnetic core/shell nanoparticles using synchrotron radiation," *J. Phys.: Condens. Matt.* 22 (2010) 385301-1-11. (KLJ)

Pigments of ancient paintings from Northern Patagonia (September 2010). Scientists from Argentina, Belgium and Venezuela determined the nature of pigments from prehistoric paintings discovered in Carriqueo rock shelter (Neuquén, Argentina). The phase analysis revealed the presence of haematite, goethite, kaolinite, and quartz as components of the pigments. A source of provenance of these materials was discussed. The diffraction data were collected at Brazilian Synchrotron Light Source. Campinas, Brazil.

C. Vázquez, O.M. Palacios, L. Darchuk, L.-M. Marcó Parra, "Compositional study of prehistoric pigments (Carriqueo rock shelter, Argentina) by synchrotron radiation X-ray diffraction," *Powder Diffraction* 25 (2010) 264-269. (WP)

Synchrotron X-ray diffraction applied to study the quality of heteroepitaxial ZnO films (September 2010). Heteroepitaxial ZnO films grown on GaN and Al₂O₃ substrates have been studied by Synchrotron X-ray Diffraction (SXR). The ZnO film grown on GaN-buffered C-Al₂O₃ showed no strains and the narrowest mosaic distribution. The measurements were performed at beamline 5C2 at the Pohang Light Source (Korea).

J.Y. Park, J.H. Je, S.S. Kim, "Synchrotron X-ray diffraction studies of heteroepitaxial ZnO films grown by pulsed laser deposition," *J. Cryst. Growth* 312 (2010) 3588-3591. (EG)

Controlling of Pd and Pt nanoparticles applicable in catalysis (October 2010). Authors from New Zealand survey the different approaches in solution-phase synthesis to obtain shaped platinum and palladium nanoparticles. Catalytic studies of the shaped nanoparticles showing enhanced activity and selectivity are highlighted. The study is based mostly on TEM experiments but also on *in-situ* XRD measurements at Australian Synchrotron (Melbourne).

S. Cheong, J.D. Watt, R.D. Tilley, "Shape control of platinum and palladium nanoparticles for catalysis," *Nanoscale* 2 (2010) 2045-2053. (ZK)

Table-top femtosecond hard X-ray source: Laser-driven plasma accelerators (October 2010). Scientists from UK, USA, Portugal and France demonstrate, that the use of a new generation of laser-driven plasma accelerators leads to directional, spatially coherent, intrinsically ultrafast beams of hard X-rays. This reduces the size of the synchrotron source from the tens of metres to the centimetre scale, simultaneously accelerating and wiggling the electron beam. Stability and resolution tests as well as single shot radiographic images are shown. The study has been performed at the Center for Ultrafast Optical Science, University of Michigan (Ann Arbor, USA).

S. Kneip, C. McGuffey, J.L. Martins, S.F. Martins, C. Bellei, V. Chvykov, F. Dollar, R. Fonseca, C. Huntington, G. Kalintchenko, A. Maksimchuk, S.P.D. Mangles, T. Matsuoka, S.R. Nagel, C.A.J. Palmer, J. Schreiber, K. Ta Phuoc, A.G.R. Thomas, V. Yanovsky, L.O. Silva, K. Krushelnick, Z. Najmudin, "Bright spatially coherent synchrotron X-rays from a table-top source," *Nature Phys.* 6 (2010) 980-983, correction 7 (2011) 737. (MS)

Application of in-situ growth techniques to monitor growth of ZnO (November 2010). A combination of X-ray reflectivity and X-ray fluorescence has been applied by an American group to monitor first stages of growth of ZnO film on Si substrate by atomic layer deposition. It was demonstrated that initially amorphous ZnO islands grow on the native oxide with the onset of coalescence occurring during the next stage. The method may provide a deeper insight in future studies of the growth process of more complex material. The experiments were carried out at Sector 12ID-B of the Advanced Photon Source (Argonne, USA).

D.D. Fong, J.A. Eastman, S.K. Kim, T.T. Fister, M.J. Highland, P.M. Baldo, P.H. Fuoss, "In situ synchrotron X-ray characterization of ZnO atomic layer deposition," *Appl. Phys. Lett.* 97 (2010) 191904-1-3. (EG)

Towards control of radionuclide migration in nuclear waste repositories (November 2010). Scientists from China present a review of studies of the lanthanides/actinides sorption speciation on minerals and oxides performed by the time resolved laser fluorescence spectroscopy (TRLFS), extended X-ray absorption fine structure spectroscopy (EXAFS) and density functional theory (DFT). This kind of study is very important for the field of nuclear disposal safety research. The interaction of lanthanides/actinides with oxides and minerals as well as their uptake are also of common interest in radionuclide chemistry. The review is a key to understanding of the physicochemical behavior of lanthanides/actinides at a molecular level in the natural environment.

X. Tan, M. Fang, X. Wang, "Sorption speciation of lanthanides/actinides on minerals by TRLFS, EXAFS and DFT studies: a review," *Molecules* 15 (2010) 8431-8468. (KLJ)

A bright table-top X-ray source (December 2010). In recent years, increasingly concentrated efforts, both in theory and experiment, have been devoted to develop efficient methods of charged particle acceleration with plasma wake fields that reduce to the centimetre scale, distances to reach GeV electron energies. The progress achieved in the field makes the desk-top solutions feasible and potentially highly competitive with 'conventional' large-scale facilities, like storage ring synchrotrons and linac free electron lasers as the short wave-length synchrotron radiation sources. The broad international collaboration lead to a report on promising results achieved in experiments carried out at the University of Michigan with a new generation of laser-driven plasma accelerator which, exploiting extreme nonlinear interactions, accelerates high-charge electron beams to high energy at short distances, to produce directional, spatially coherent, intrinsically ultrafast beams of hard X-rays.

S. Kneip, C. McGuffey, J.L. Martins, S.F. Martins, C. Bellei, V. Chvykov, F. Dollar, R. Fonseca, C. Huntington, G. Kalintchenko, A. Maksimchuk, S.P.D. Mangles, T. Matsuoka, S.R. Nagel, C.A.J. Palmer, J. Schreiber, K. Ta Phuoc, A.G.R. Thomas, V. Yanovsky,

L.O. Silva, K. Krushelnick, Z. Najmudin, "Bright spatially coherent synchrotron X-rays from a table-top source," *Nature Phys.* 6 (2010) 980-983. (EAG)

Review of hard and soft X-ray microscopy and tomography techniques applicable in catalysis (December 2010). Scientists from review X-ray microscopy and tomography techniques with micrometre resolution but also the possibility to follow structural changes in the sub-100 nm regime of heterogeneous catalysts. X-ray microscopy as well as coherent X-ray diffraction imaging techniques are described together with the challenging design of suitable environmental cells. Examples are based on measurements at ESRF (Grenoble, France), Advanced Photon Source (Chicago, USA), ANKA (Karlsruhe, Germany), and HASYLAB (Hamburg, Germany).

J.-D. Grunwaldt, C.G. Schroer, "Hard and soft X-ray microscopy and tomography in catalysis: bridging the different time and length scales," *Chem. Soc. Rev.* 39 (2010) 4741-4753. (ZK)

Synchrotron radiation imaging techniques allow for visualisation of catalytic solids (December 2010). Authors from Debye Institute for NanoMaterials Science, Utrecht, Netherlands review the chemical-imaging techniques useful in heterogeneous catalysis, available on synchrotron for a long range of world synchrotrons. Encompasses spectroscopy, microscopy, tomography and various imaging techniques of different spatial resolution with catalytical examples. Exemplary data have been measured on a range of synchrotrons (BESSY, HASYLAB, ESRF etc), future prospects discuss the use of FEL facilities.

A.M. Beale, S.D.M. Jacques, B.M. Weckhuysen, "Chemical imaging of catalytic solids with synchrotron radiation," *Chem. Soc. Rev.* 39 (2010) 4656-4672. (ZK)

2D electron gas at the SrTiO₃ surface ((January 2011). Properties of the two-dimensional electron gas at the surface of SrTiO₃, a material applicable in electronics, have been determined by a big team (affiliations in France, USA, Germany, Argentina, Spain and China) using angle-resolved photoemission spectroscopy at the Synchrotron Radiation Center (University of Wisconsin-Madison) and at the Synchrotron SOLEIL (France).

A.F. Santander-Syro, O. Copie, T. Kondo, F. Fortuna, S. Pailhès, R. Weht, X.G. Qiu, F. Bertran, A. Nicolaou, A. Taleb-Ibrahimi, P. Le Fèvre, G. Herranz, M. Bibes, N. Reyren, Y. Apertet, P. Lecoeur, A. Barthélémy, M.J. Rozenberg, "Two-dimensional electron gas with universal subbands at the surface of SrTiO₃," *Nature* 469 (2011) 189-194. (WP)

ALD chamber for in-situ synchrotron X-ray scattering study of film growth (February 2011). Monitoring of the layer growth by ALD can be achieved through synchrotron X-ray reflectivity and two-dimensional grazing-incidence X-ray diffraction measurements. The work has been completed by a Korean team at the Korean light source in Pohang.

Y.J. Park, D.R. Lee, H.H. Lee, H.B. Lee, H. Kim, G.C. Park, S.W. Rhee, S. Baik, "In-situ synchrotron X-ray scattering study of thin film growth by atomic layer deposition," *J. Nanosci. Nanotechnol.* 11(2) (2011) 1577-1580. (WP)

New, promising method for protein structure determination at hard-X-ray free-electron laser (February 2011). A multinational team led by H.N. Chapman presents

experimental results validating a completely new method for structure determination of macromolecules that do not yield crystals of sufficient size for studies using conventional radiation sources or are particularly sensitive to radiation damage. Single-crystal X-ray diffraction ‘snapshots’ were collected from a fully hydrated stream of nanocrystals using femtosecond pulses from a hard-X-ray free-electron laser, the Linac Coherent Light Source.

H.N. Chapman *et al.* "Femtosecond X-ray protein nanocrystallography," *Nature* 470 (2011) 73-78. (RS)

Why yellow Sunflowers in the paintings by van Gogh are darkening? (February 2011). To answer this questions an international team of researchers under the leadership of Koen Janssens and Joris Dik studied the darkening phenomenon applying synchrotron-radiation high-lateral-resolution spectroscopic techniques such as: microscopic X-ray absorption near edge (μ -XANES), X-ray fluorescence spectrometry (μ -XRF), micro-Raman and mid-FTIR analyses. Investigations carried out on the pigment samples prepared in the laboratory as well as on the micro-samples taken from original two paintings by Vincent van Gogh revealed that darkening of the yellow pigment (chrome yellow) is caused by reduction of PbCrO_4 to $\text{Cr}_2\text{O}_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$, likely accompanied by the presence of other Cr(III) compounds.

L. Monico, G. Van der Snickt, K. Janssens, W. De Nolf, C. Miliani, J. Dik, M. Radepon, E. Hendriks, M. Geldof, M. Cotte, "Degradation process of lead chromate in paintings by Vincent van Gogh studied by means of synchrotron X-ray spectromicroscopy and related methods. 2. Original paint layer samples," *Anal. Chem.* 83 (2011) 1224-1231. (ARL)

Improved FTIR microspectroscopy based imaging technique (March 2011). An American group has developed a FTIR imaging multiple-beam technique characterized by high resolution, good chemical sensitivity and high acquisition speed. Examples of application for biological samples are demonstrated. The experiments were performed at Synchrotron Radiation Center, Univ. of Wisconsin-Madison.

M.J. Nasse, M.J. Walsh, E.C. Mattson, R. Reininger, A. Kajdacsy-Balla, V. Macias, R. Bhargava, C.J. Hirschmugl, "High-resolution Fourier-transform infrared chemical imaging with multiple synchrotron beams", *Nature Methods* (2011) 413-416. (WP)

Lithium metal at non-ambient conditions (March 2011). A team of scientists affiliated in UK, France and US has determined the structures of lithium metal submitted to high pressure (up to 130 GPa) and low temperature conditions (77-300 K). The study, performed at ID-09 beamline at the ESRF and 16-ID-B (HPCAT) beamline at the APS (USA) was a challenge because of the weak signal due to the weak scattering of lithium ions. A p - T phase diagram combining the existing data is proposed.

C.L. Guillaume, E. Gregoryanz, O. Degtyareva, M.I. McMahon, M. Hanfland, S. Evans, M. Guthrie, S.V. Sinogeikin, H.-K. Mao, "Cold melting and solid structures of dense lithium," *Nature Phys.* 7 (2011) 211-214. (WP)

Test experiments on silicon melting process at extreme conditions (March 2011). Ultrafast pump and probe experiments in the 0.1–10 ps range on silicon melting [rocess have been performed by a French-Italian group at the TIMEX endstation of the FERMI free electron laser (Basovizza/Trieste, Italy). Evolution of the optical properties of the material in the picosecond scale is described. The current and future status of the endstation is discussed.

A. Di Cicco, F. D'Amico, G. Zgrablic, E. Principi, R. Gunnella, F. Bencivenga, C. Svetina, C. Masciovecchio, F. Parmigiani, A. Filippini, "Probing phase transitions under extreme conditions by ultrafast techniques: Advances at the Fermi@Elettra free-electron-laser facility," *J. Non-Cryst. Solids* 357 (2011) 2641-2647. (WP)

Time-resolved photoelectron spectroscopy at SOLEIL (March 2011). A new two-dimensional delay-line detector tested at the SOLEIL synchrotron having a time resolution of 5 ns was installed on a Scienta SES 2002 electron energy analyzer. It replaced the CCD camera-based two dimensional detection of electron energy analyzers and was adapted to the time structure of the SOLEIL synchrotron. Its first application was a characterization of the time of flight of the photoemitted electrons as a function of their kinetic energy and the selected pass energy. By repeating the experiment as a function of the available pass energy and of the kinetic energy, a complete characterization of the analyzer behavior in the time domain has been obtained. Now, one can perform the pump-probe photoelectron spectroscopy experiments with the time resolution given by the SOLEIL pulse width.

N. Bergeard, M.G. Silly, D. Krizmancic, C. Chauvet, M. Guzzo, J.P. Ricaud, M. Izquierdo, L. Stebel, P. Pittana, R. Sergo, G. Cautero, G. Dufour, F. Rochet, F. Sirotti, "Time-resolved photoelectron spectroscopy using synchrotron radiation time structure," *J. Synchrotr. Radiat.* 18 (2011) 245-250. (KLJ)

Weak itinerant ferromagnetism develops during dimer breaking (March 2011). X-ray diffraction experiments performed by Scientists from Princeton University and Argonne Natl. Lab. (USA) at Advanced Photon Source beam line 11-BM on $\text{SrCo}_2(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)_2$, followed by structure refinement, demonstrate that during dimer breaking, weak itinerant ferromagnetism develops. The chemical bond breaking as a tuning parameter to induce a quantum critical point can be helpful in design and studies of novel magnetic materials.

S. Jia, P. Jiramongkolchai, M.R. Suchomel, B.H. Toby, J.G. Checkelsky, N.P. Ong, R.J. Cava, "Ferromagnetic quantum critical point induced by dimer-breaking in $\text{SrCo}_2(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)_2$," *Nature Phys.* 7 (2011) 207-210. (WP)

X-ray fluorescence detection free of self-absorption (March 2011). Scientists from Canada demonstrate that the X-ray emission from any element that is not resonant with the absorption edge under investigation can be used for registration of the absorption edge and the measured signal is free from self-absorption. It was found that the inverse of such partial fluorescence yield (PFY) is linearly proportional to the X-ray absorption cross-section without any correction due to saturation or self-absorption. Their term this technique *inverse partial fluorescence yield* (IPFY). This technique was demonstrated by measuring O K_α PFY from high- T_c cuprate

LNSCO when scanning the Cu $L_{2,3}$ edge and Nd $M_{4,5}$ edge. The studies were performed at Canadian Light Source.

A.J. Achkar, T.Z. Regier, H. Wadati, Y.-J. Kim, H. Zhang, D.G. Hawthorn, "Bulk sensitive X-ray absorption spectroscopy free of self-absorption effects," *Phys. Rev. B* 83 (2011) 081106(R)-1-4. (KLJ)

Iron pnictide superconductor: All hands on deck! (April 2011). One synchrotron is not enough. Scientists from China and U.S. provided the key structural information in understanding the origin of the pressure dependence of superconducting transition temperature (T_c) for 111-type iron pnictide superconductors. The effect of pressure on the crystalline structure and T_c of the 111-type $Na_{1-x}FeAs$ system using in-situ high-pressure synchrotron X-ray powder diffraction and diamond anvil cell techniques was studied at Advanced Photon Source, Argonne National Laboratory (Argonne, United States) and at National Synchrotron Light Source (Brookhaven National Laboratory, Upton, NY, United States).

Q. Liu, X. Yu, X. Wang, Z. Deng, Y. Lv, J. Zhu, S. Zhang, H. Liu, W. Yang, L. Wang, H. Mao, G. Shen, Z.-Y. Lu, Y. Ren, Z. Chen, Z. Lin, Y. Zhao, C. Jin, "Pressure-induced isostructural phase transition and correlation of FeAs coordination with the superconducting properties of 111-type $Na_{1-x}FeAs$," *J. Am. Chem. Soc.* 133 (2011) 7892-7896. (PP)

Solid-to-plasma transition and atomic order decay studied at FLASH free electron laser (April 2011). Researchers from eight countries (France, UK, Pakistan, USA, Germany, The Netherlands, Poland, and Czech Republic) have determined variation of atomic order after fast irradiation of aluminium foil by the femtosecond pulse of FLASH free-electron laser, and properties and evolution of plasma created by irradiation.

E. Galtier *et al.*, "Decay of crystalline order and equilibration during the solid-to-plasma transition induced by 20-fs microfocused 92-eV free-electron-laser pulses," *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 164801-1-4. (WP)

Combined X-ray microscopy and electron microscopies used for determination of architecture of corals (on line May 2011). Collaboration between eight French, Canadian, Polish and American institutes resulted in a study of the aragonite crystallites orientation and distribution in corals. The obtained data provide information on the nanometer-scale processes leading to biomineral formation. The X-ray microscopy experiments were performed at Stanford Synchrotron Radiation Light Source (Stanford, USA).

K. Benzerara, N. Menguy, M. Obst, J.L. Stolarski, M. Mazur, T. Tyliczszak, G.E. Brown Jr., A. Meibom, "Study of the crystallographic architecture of corals at the nanoscale by scanning transmission X-ray microscopy and transmission electron microscopy," *Ultramicroscopy* (2011), in print. (WP)

X-ray absorption microbeam studies of a diluted magnetic semiconductor (May 2011). International group of scientists reported results of studies of the local atomic structure of highly homogeneous $Ga_{1-x}Mn_xN$ alloy films ($0.03 < x < 0.09$) by means of Mn and Ga K -edge extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) measurements. In the studied films, grown by molecular beam epitaxy, the Mn atoms are in tetrahedral configuration, independently of the

Mn concentration. A small increase in the interatomic distances is observed with increasing Mn content. The Debye-Waller factor does not show a significant trend as Mn content increases. This finding suggests the presence of short-range disorder in the GaN lattice. *Ab-initio* calculations of the structural parameters for two different Mn concentrations are consistent with the experimental results. The measurements were carried out at the soft and hard X-ray microprobes, beam lines ID21 and ID22, of the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF).

O. Sancho-Juan, O. Martinez-Criado, A. Cantarero, N. Garro, M. Salom, J. Susini, D. Olguin, S. Dhar, K. Ploog, "Extended X-ray absorption fine structure in $Ga_{1-x}Mn_xN/SiC$ films with high Mn content," *Phys. Rev. B* 83 (2011) 172103-1-4. (KLJ)

Elemental analysis may help in brain-tumor classification (on line July 2011). A team from AGH University of Technology (Cracow, Poland) has studied various types of brain tumors (glioblastoma multiforme, gemistocytic astrocytoma, oligodendroglioma, anaplastic oligodendroglioma, ganglioglioma, fibrillary astrocytoma, and atypical transitional meningioma). using X-ray fluorescence. The results indicate that studies of elemental tissue composition focused on some specific elements may be helpful in classification of brain tumors.

M. Szczerbowska-Boruchowska, M. Lankosz, D. Adamek, "First step toward the "fingerprinting" of brain tumors based on synchrotron radiation X-ray fluorescence and multiple discriminant analysis," *J. Biol. Inorg. Chem.* (on line July 3, 2011), in print. (WP)

Inkjet printing technique developed for producing organic semiconducting films (July 2011). Collaboration of researchers from three Japanese institutions led to development of a method of single-crystalline organic semiconductor deposition through the inkjet printing process. X-ray diffraction at Photon Factory synchrotron (Tsukuba, Japan) was used to prove the good film quality. An important element of the method is the development of special functional ink containing the given semiconductor. The elaborated method can be considered as worth considering for future production of cheap electronic devices. This method provides a new useful way of fabrication of transistor arrays on top of plastic substrates, permitting to create large-area, light-weight and high-speed electronic products.

H. Minemawari, T. Yamada, H. Matsui, J. Tsutsumi, S. Haas, R. Chiba, R. Kumai, T. Hasegawa, "Inkjet printing of single-crystal films," *Nature* 475 (2011) 364-367. (WP)

New view of magnetic domains: Diffraction of linearly polarized X-rays (July 2011). Scientists from USA, UK, Germany and France report the proof-of-principle experiment of iterative phase retrieval from magnetic X-ray diffraction with a spatial resolution of about 75 nm. An experiment performed on amorphous terbium-cobalt thin film showed that resonant excitation and coherent scattering of linearly polarized soft X-rays can be used to image both the amplitude and the phase of magnetic domain structures on nanometer scale. The study has been performed at Advanced Light Source (Berkeley, USA).

J.J. Turner, X. Huang, O. Krupin, K.A. Seu, D. Parks, S. Kevan, E. Lima, K. Kisslinger, I. McNulty, R. Gambino, S. Mangin, S. Roy, P. Fischer, "X-ray diffraction microscopy of magnetic structures," *Phys. Rev. Lett.* 107 (2011) 033904-1-4. (MS)

A model of absorption background for the practical EXAFS analysis (July 2011). The application of the atomic absorption signal as a proper EXAFS background is demonstrated and discussed in the analysis of Ba hexaferrite nanoparticles with a very weak structural signal. The essential gain is found in the decrease of uncertainty intervals of structural parameters and their correlations. A simple analytical model of the calculation of the absorption background for the practical EXAFS analysis is demonstrated.

J. Padeznik Gomilek, A. Kodre, I. Arcon, S. de Panfilis, D. Makovec, "Atomic absorption background of Ba in EXAFS analysis of BaFe₁₂O₁₉ nanoparticles," *J. Synchrotr. Radiat.* 18 (2011) 557-563. (KLJ)

X-ray diffraction and absorption study of (Ga,Mn)N (July 2011). In an experimental study of (Ga,Mn)N, collaborating researchers from Austria, Poland and France have used various techniques including synchrotron high-resolution X-ray diffraction, EXAFS and XANES, which helped in verifying predictions concerning the ferromagnetism in dilute magnetic insulators and to demonstrate that the interaction changes from ferromagnetic to antiferromagnetic when the charge state of the Mn³⁺ is reduced to Mn²⁺.

A. Bonanni, M. Sawicki, T. Devillers, W. Stefanowicz, B. Faina, T. Li, T.E. Winkler, D. Sztankiel, A. Navarro-Quezada, M. Rovezzi, R. Jakiela, A. Grois, M. Wegscheider, W. Jantsch, J. Suffczyński, F. D'Acapito, A. Meingast, G. Kothleitner, T. Dietl, "Experimental probing of exchange interactions between localized spins in the dilute magnetic insulator (Ga,Mn)N," *Phys. Rev. B* 84 (2011) 035206-1-11. (WP)

Semiconductor area detector for experiments at free electron lasers (September 2011). The prototype semiconductor area detector (194x185 pixels, 110x110 micrometer pixel size) for FEL experiments is described in a paper by scientists affiliated in US. It is able to handle high flux rates and continuous frames rates exceeding 120 Hz. Information on plans of further developments is provided. The detector was tested at LCLS light source Linac Coherent Light Source (Menlo Park, USA).

H.T. Philipp, M. Hromalik, M. Tate, L. Koerner, S.M. Gruner, "Pixel array detector for X-ray free electron laser experiments", *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A* 649 (2011) 67-69. (AZ).

News in the above section were prepared by:

E. Guziewicz (EG), K. Ławniczak-Jablonska (KLJ), M.T. Klepka (MTK), W. Paszkowicz (WP), R. Sobierajski (RS), and A. Wierzbicka (AW) (Institute of Physics PAS, Warsaw), Z. Kaszkar (ZK) (Institute of Physical Chemistry PAS, Warsaw), W. Kwiatek (WK) (Institute of Nuclear Physics PAS, Cracow), M. Sikora (MS) and A. Zięba (AZ) (AGH University of Technology, Cracow), E.A. Gorlich (EAG) and A. Rafalska-Łasocha (ARL) (Jagellonian University, Cracow), P. Piszora (PP) (Adam Mickiewicz University, Poznań).

NEW MACHINES & BEAMLINES. OTHER EVENTS

New diffraction-oriented beamline at ELETTRA (2010). The new beamline, MCX, at the Italian synchrotron Elettra in Trieste is devoted to the X-ray diffraction stress and texture analysis of thin films and surfaces.

New SAXS beamline at MAXlab (2011). A new SAXS beamline, 911-4, at MAX-lab (Lund, Sweden) allows for SAXS studies with high (a few nm) resolution.

SOLARIS (first synchrotron light source in Poland): Design and ground breaking (2011/2012). Solaris project (National Synchrotron Radiation Centre at Jagiellonian University) is entering important and dynamic stage. The name of the center was inspired by the title of world famous novel "Solaris" (published 1961) by Stanisław Lem. The first contracts for the machine hardware have been signed. The iron blocks for the storage ring magnet structures have been casted and are already undergoing thermal treatment before precise machining. The terms of the contract for the injecting linac sections has been agreed upon and will be signed shortly while the RF modulators powering the linac are being produced. The Solaris building design is going to be finalized in September followed by the building permit application. Ground breaking is expected early in 2012.

Imaging beamline at the DIAMOND source (2012). A new beamline, I13, devoted to X-ray imaging at Diamond (Didcot, UK) will become operational in 2012. Collection of high-quality 3D images of various objects will be possible.

New spectroscopy beamline at ESRF (2013). The beamline, UPBL6, is under construction in ESRF, Grenoble. It will enable studies of electronic excitations using inelastic X-ray scattering (RIXS), X-ray Raman spectroscopy and emission spectroscopy.

Establishment of the European Synchrotron User Organization (ESUO) (March 2010). The establishment of the European Synchrotron User Organization (ESUO), an organization representing the interests of European users of synchrotron radiation is described by U. Pietsch and M.J. Cooper, *J. Synchrotr. Radiat.* 17 (2010) 428-429.

FUTURE CONFERENCES & WORKSHOPS

Instrumentation and Methods Development for Synchrotron-based Biomedical Research (DESY Hamburg, October 5 - 7, 2011),
http://sni-portal.uni-kiel.de/kfs/Archiv/1st-Announcement_Biomedical-Workshop.doc

3rd ANKA / KNMF Joint Users Meeting (Karlsruhe, Germany, October 13 - 14, 2011),
<http://anka.iss.kit.edu/english/448.php>

24th MAX-lab Annual User Meeting (Lund, Sweden, November 14-16, 2011),
<http://www.maxlab.lu.se/usermeeting/index.html>

NSRRC users meeting, design discussion of the XPCS/cSAXS beamline at TPS, protein solution SAXS/SANS data analysis tutoring (Hsinchu, Taiwan, October 19 - 21, 2011), <http://usersmtn.nsrc.org.tw/eng/>

New Science Opportunities at FLASH (Hamburg, Germany, October 12 - 14, 2011),
<https://indico.desy.de/conferenceDisplay.py?ovw=True&confId=4425>

6th Asia-Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research and 4th SLRI Annual User Meeting (Bangkok, Thailand, October 24 - 28, 2011),
<http://www.slri.or.th/aofsrr2011/index.php>

International Conference on the Use of X-ray and Related Techniques in Arts and Cultural Heritage (Sharjah/ Dubai, United Arab Emirates, December 7 - 8 2011),
<http://www.aus.edu/conferences/XTACH11/index.php>

Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków (Warszawa 8 - 9 grudnia, 2011), <http://www.chem.uw.edu.pl/archeometria/>

Improving the data quality and quantity for XAFS experiments (Q2XAFS) (Photon Factory, KEK, Tsukuba Japan, December 8 - 9, 2011),
<http://pfwww.kek.jp/Q2XAFS2011/>

Laue Day and 20th Annual Meeting of DGK (a conference commemorating the discovery of X-ray diffraction) (Munich, March 12 - 15, 2012), www.dgk-conference.de

IEEE Symposium on Biomedical Imaging (ISBI 2012), (Barcelona, May 2 - 5, 2012),
<http://www.biomedicalimaging.org/>

International School of Crystallization (ISC), (Granada, May 21 - 25, 2012), <http://www.iscgranada.org/>

11th International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Sciences (ISSRNS 2012) (Kraków, Poland, May 20 - 25, 2012),
<http://issrns2012.ifj.edu.pl/>

International School of Crystallography, 45th Course: Present and Future Methods for Biomolecular

Crystallography (Erice, Italy, May 31 - June 10, 2012),
<http://www.csem.infn.it>,
<http://www.crystallalice.org/Erice2012/2012.htm>

11th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (Lyon, France, July 9 - 13, 2012),
<http://sri2012.org/>

Science at FELs (a satellite meeting to the 11th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation in Lyon, France) (Hamburg, July 15 - 18, 2012, <http://science-at-fels-2012.desy.de>

Experimental and Computational Bio-Imaging and Visualization, a symposium within the 15th International Conference on Experimental Mechanics (ICEM15), (Porto, Portugal, July 22 - 27, 2012),
www.fe.up.pt/clme/icem15/index.htm

International Small-Angle Scattering Conference (SAS2012) (Sydney Australia, November 18 - 23, 2012),
<http://www.sas2012.com/>

15th International Summer School on Crystal Growth (Gdańsk, Poland, August 6 - 10, 2013),
<http://science24.com/event/isscg15/>

17th International Conference on Crystal Growth and (jointly) 15th International Conference on Vapor Growth and Epitaxy (ICCG-17 & ICVGE-15), (Warsaw, Poland, August 11 - 16, 2013), <http://science24.com/event/iccg17/>

More news at: <http://www.lightsources.org/cms/>.

Krystalografia białek w kryształowej kuli

Mariusz Jaskólski ^{a,b}

^a Zakład Krystalografii, Wydział Chemii, Uniwersytet im. A. Mickiewicza

^b Centrum Badań Biokryystalograficznych, Instytut Chemii Bioorganicznej PAN, Poznań
mariuszj@amu.edu.pl

Głównym celem biologii strukturalnej jest zrozumienie na poziomie atomowym mechanizmów molekularnych procesów określanych jako "życie", poprzez poznanie struktury i funkcji makromolekuł biologicznych, w pierwszej kolejności białek. Podstawową metodą badawczą jest krystalografia białek, stosująca dyfrakcję promieniowania rentgenowskiego na kryształach makromolekuł w celu poznania ich budowy atomowej. Krystalografia białek przeszła w ostatnich kilku dekadach przez trzy kolejne rewolucje, które doprowadziły do jej nieoczekiwanego odrodzenia i bezprecedensowego rozkwitu. Rewolucje te związane były kolejno z wprowadzeniem promieniowania synchrotronowego do rutynowych pomiarów dyfrakcyjnych, z wdrożeniem metody dostrojonej dyfrakcji anomalnej (MAD) na atomach selenu do automatycznego rozwiązywania problemu fazowego, oraz z zapoczątkowaniem programów genomiki strukturalnej (SG). Można oczekiwać, że w następnych 10-15 latach krystalografia białek nadal będzie w tej fazie rewolucyjnych przemian. Spodziewać się należy nie tylko lawiny struktur białkowych rozwiązywanych masowo w centrach genomiki strukturalnej, ale także sięgania po coraz ambitniejsze cele strukturalne, takie jak białka membranowe czy ogromne kompleksy makromolekularne. Na gruncie technik doświadczalnych można oczekiwać rychłego wprowadzenia promieniowania rentgenowskiego z lasera na swobodnych elektronach. Zrewolucjonizuje to całkowicie perspektywy eksperymentalne, umożliwiając na przykład badanie dyfrakcji na pojedynczych molekułach czy na kompletnych obiektach biologicznych, takich jak komórki organizmów żywych.

Keywords: protein crystallography; structural biology; high-throughput crystallography; structural genomics; single-particle imaging; synchrotron radiation; X-ray free-electron laser;

Niełatwo snuć przepowiednie, szczególnie dotyczące przyszłości. Zacznę więc swoje uwagi na temat przyszłości krystalografii biologicznej, nazywanej często krystalografią białek, od podsumowania kilku rewolucyjnych przemian, jakie dokonały się na tym polu w ostatnich kilkudziesięciu latach.

Na przełomie lat 70. i 80. ubiegłego stulecia wydawało się, że krystalografia białek powiedziała już swoje ostatnie słowo i osiągnęła status bardzo dojrzałej dyscypliny, wzbogacającej systematycznie skarbiec wiedzy strukturalnej o 10-20 struktur makromolekularnych rocznie. I oto w trzech kolejnych dekadach krystalografią białek wstrząsnęły trzy kolejne rewolucje, prowadzące do jej odrodzenia, widocznego w eksplozji aktywności, charakteryzującej się aktualnie liczbą 7000 struktur rocznie i sumą prawie 60000 struktur krystalograficznych zdeponowanych do dziś w Banku Struktur Białkowych PDB (Protein Data Bank) [2].

Pierwsza z tych rewolucyjnych przemian miała miejsce w latach 80. i związana była z wprowadzeniem promieniowania synchrotronowego (SR) do rutynowych pomiarów dyfrakcyjnych [3]. Rentgenowskie promieniowanie generowane w olbrzymich instalacjach synchrotronowych początkowo traktowano w krystalografii jako interesującą ciekawostkę naukową, ale na przestrzeni kilku lat zdominowało ono eksperymenty dyfrakcyjne, sprawiając, że

uciążliwe tygodniowe pomiary można było skrócić do zaledwie kilku godzin. Dziś, najsilniejsze linie synchrotronowe trzeciej generacji umożliwiają skrócenie pomiarów do sekund. Co więcej, poprawiła się jednocześnie radykalnie jakość danych, mimo że stosowane kryształy są coraz mniejsze, "kurcząc" się obecnie do rozmiarów zaledwie 10 µm. Zastosowanie SR stało się jednocześnie siłą napędową kolejnych innowacji, z których najważniejszą było przeniesienie praktycznie wszystkich pomiarów białkowych do temperatury ciekłego azotu (ok. 100 K). Pełne zautomatyzowanie eksperymentu to inny aspekt pomiarów synchrotronowych. Już dziś sporo eksperymentów przeprowadza się za pomocą łącz internetowych w sposób zdalny, na kryształach wysłanych uprzednio (w formie "zamrożonej" do 100 K) pocztą kurierską do (często bardzo odległego) ośrodka synchrotronowego [4] (tzw. "Fedex crystallography").

Druga rewolucja zaszła w latach 90. i wiązała się z rozpracowaniem teorii [5] metody MAD ("Multiwavelength Anomalous Diffraction", czyli dostrojonej dyfrakcji anomalnej) oraz, przede wszystkim, jej aspektów praktycznych [6] związanych z zastosowaniem selenu (wprowadzanego do białka w postaci selenometioniny, Se-Met) jak głównego anomalnego "konienia pociągowego" w

sprawnym (bo algebraicznym) rozwiązywaniu problemu fazowego.

Dziś istnieją również algorytmy fazowania wykorzystujące znacznie prostsze podejście SAD [7] oparte na jednej długości fali. Jednakże, aby metody te mogły mieć walory rutynowego "wysokoprzepustowego" (HT od "High Throughput") algorytmu, konieczny był kolejny przełom.

Wkroczył on do krystalografii białek wraz z nowym Tysiącleciem. Spektakularne sukcesy projektów sekwencjonowania genomów, z mającym niemal symboliczny wymiar zsekwencjonowaniem genomu ludzkiego w 2002 roku [8,9] na czele (dziś znamy pełną sekwencję kilkuset genomów), uświadomiły nam jednak przy okazji dość kłopotliwą sprawę, że oto mianowicie w ogóle nie rozumiemy księgi genomu zapisanej literami ATGC, i że do zrozumienia tej informacji niezbędne jest przełożenie jej na język struktury białek. Potrzebna była metoda, która szybko w trybie wysokoprzepustowym byłaby w stanie dostarczyć niezbędną informację strukturalną. Tak zrodziła się genomika strukturalna (SG), stawiająca sobie za cel poznanie struktury proteomu, tj. wszystkich białek danego organizmu, a wraz z nią ponownie odrodziła się krystalografia białek, jako metoda z wyboru mogąca w sposób szybki, stosunkowo niedrogi i jednocześnie bardzo wiarygodny sprostać temu wyzwaniu. W połączeniu z inżynierią genetyczną (i inżynierią białka), dostarczającą w sposób niemal automatyczny kolejnych białek rekombinowanych, biokrystalografia stała się niezwykle potężnym narzędziem badawczym. W krajach wysokorozwiniętych pojawiło się niemal równocześnie wiele ośrodków genomiki strukturalnej. Choć ich szumne hasła zalaniasz nas powodzia struktur nie spełniły się jeszcze w pełnym zakresie, już odczuliśmy skutki tego przełomu, przede wszystkim w postaci wprost niewiarygodnego postępu metodycznego.

Czas przedzierać się z "historyka" we "wrózkę" i zacząć dywagować o przyszłości. Zaczę od tego, że wydaje mi się, iż genomika strukturalna niebawem, po okresie polowania na łatwe cele, zacznie, zgodnie z obietnicą dostarczać struktur w tempie lawinowym. Genom ludzki koduje ok. 30000 białek a większość z nich to nadal wielka niewiadoma. W dodatku produktów białkowych jest znacznie więcej ze względu na alternatywne składanie genów i inne mechanizmy RNA. A na zbadanie czekają przecież także białka z niezliczonych innych organizmów, które towarzyszą nam na Ziemi. Wszystko więc wskazuje na to, że krystalografia białek będzie miała "pełne ręce roboty" jeszcze przez następnych kilkanaście lat.

Ale liczby to nie wszystko. Należy oczekiwać, że krystalografia będzie atakować w przyszłości coraz trudniejsze problemy, np. stanowiące dotąd tabu białka błonowe, które nie poddają się znanym metodom krystalizacji, a które prawdopodobnie dominują w naszym proteomie. Choć już dziś mamy coraz więcej struktur białek błonowych w PDB, możemy przewidywać, że najbliższe lata przyniosą radykalny postęp na tym polu. Wydaje mi się, że spowoduje to zmianę naszych poglądów na świat struktury białek, do tej pory zdominowany przez rozpuszczalne białka globularne.

Inną dziedziną, w której można oczekiwać rewolucji, są badania strukturalne olbrzymich kompleksów białkowych, również z udziałem białek błonowych. Już dziś znamy strukturę kilkuset wirusów, a zeszłoroczna Nagroda Nobla w dziedzinie chemii ukoronowała heroiczne zmagania o poznanie struktury atomowej rybosomu, tj. organelli, w której, jak w fabryce, produkowane są wszystkie białka wszystkich komórek żywych na świecie. Dzięki wysiłkom zeszłorocznych Noblistów, Ramakrishnana, Steitz i Yonath [10–13], znamy dziś dokładną pozycję w przestrzeni każdego z około 200000 atomów niewodorowych rybosomu bakterii. Ale rybosom jest bardzo trwałym kompleksem makromolekularnym. W najbliższej przyszłości natomiast krystalografia zacznie atakować strukturę znacznie słabiej scementowanych kompleksów, których krótkotrwałe pojawianie się i znikanie w komórce wyznacza prawdopodobnie rytm procesów życiowych. Głównym celem tych badań będzie zrozumienie rozpoznawania molekularnego w takich "przelotnych związkach" cząsteczek życia.

Wyzwania biologii to tylko jeden z motorów postępu w krystalografii białek w najbliższych kilkunastu latach. Drugim motorem będzie "skok kwantowy" czekający nas już niebawem na polu nauk fizycznych. Oto ziszcza się niebawem wieloletnie marzenia o posiadaniu lasera rentgenowskiego. Wkrótce okaże się, że źródła synchrotronowe trzeciej generacji, uważane dotąd za szczyt możliwości w generacji promieniowania rentgenowskiego, dosłownie "przygasną" w świetle astronomicznie jasnego błysku światła lasera rentgenowskiego. Tego typu urządzenie, w przeciwieństwie do lasera konwencjonalnego, nie działa w trybie oscylacyjnym lecz jest konstrukcją otwartą, o długości do kilkudziesięciu kilometrów; stąd też jego nazwa: laser rentgenowski na swobodnych elektronach (X-ray Free Elektron Laser, XFEL). Obecnie nie wiemy nawet, w jaki sposób da się najlepiej wykorzystać wiązkę lasera XFEL, która będzie o ponad 10 rzędów wielkości bardziej intensywna niż promieniowanie z synchrotronu. Wyobraźnia (szczególnie w zakresie "obrazowania") nie ma tu prawie żadnych ograniczeń!

Jedną z możliwości, testowana obecnie przy tradycyjnych synchrotronach, zakłada badanie struktury kryształu w niesłychanie krótkim czasie [14]. Już teraz możliwe jest zarejestrowanie pełnego obrazu dyfrakcyjnego tzw. metodą Lauego w czasie 1 ns. W przyszłości osiągalny będzie czas krótszy niż 1 ps. Robiąc serię poklatkowych zdjęć struktury z tak szybką "migawką", będziemy w stanie odtworzyć trajektorię przemiany chemicznej lub fizycznej przebiegającej wewnątrz kryształu. W skali naszych zmysłów, przemiana taka mogłaby być bardzo szybka (trwać np. 1 ms lub nawet 1 fs), jednak mimo to byłibyśmy w stanie odtworzyć jej przebieg od początku do końca. Tak więc w zasięgu możliwości krystalografii są nie tylko statyczne struktury kryształów ale także dynamika białek i kinetyka procesów, którym ulegają.

Pojawia się jednak pytanie, czy dysponując tak silnymi źródłami promieniowania rentgenowskiego, musimy odwoływać się ciągle do kryształu? Kryształ jest nam potrzebny w charakterze wzmacniacza koncentrującego

słabiutkie rozpraszanie od pojedynczej cząsteczki w pikach braggowskich. Jeśli jednak dysponujemy wiązką lasera, która jest miliardy razy bardziej intensywna, "wzmocniacz" sygnałów staje się niepotrzebny. Obliczenia teoretyczne [15] potwierdzają, że powinna udać się rejestracja rozpraszania na pojedynczej molekuły. To nic, że ulegnie ona natychmiast dysocjacji. Jeśli tylko zdołamy przedtem zarejestrować jej obraz dyfrakcyjny – strukturę da się bez trudu wyliczyć, gdyż ciągła transformata Fouriera obiektu nieperiodycznego zawiera aż nadto danych do rozwiązania problemu fazowego. Podejście to jest intelektualnie bardzo pociągające. Oto wychodząc z koncepcji opartej na krystalografii, porzucamy okowy narzucony przez kryształ, a mimo to w ostateczności stosujemy aparat matematyczny mający właśnie krystalograficzny rodowód.

Jeśli już myślimy tak śmiało, idźmy dalej. Dlaczegoż mielibyśmy ograniczać nasz aperiodyczny obiekt do pojedynczej cząsteczki? Przecież równie dobrze mógłby to być olbrzymi kompleks makromolekularny, a nawet... cała komórka biologiczna, na której też można uzyskać rozpraszanie. Wstępny rekonesans eksperymentalny został już przeprowadzony i wyniki są nader obiecujące. Jest coś symbolicznego w fakcie, że pionierem tych metod jest, mimo zaawansowanego wieku, David Sayre [16] – współtwórca metod bezpośrednich rozwiązywania problemu fazowego w krystalografii.

Pisząc, że idea laserów rentgenowskich XFEL niebawem się ziści – rozminąłem się nieco z rzeczywistością, gdyż pierwszy laser rentgenowski na swobodnych elektronach już działa na Uniwersytecie Stanforda w USA i badacze już mogą występować o przydział czasu pomiarowego na tym urządzeniu! Kolejny laser XFEL zostanie oddany do użytku wkrótce w ośrodku DESY w Hamburgu. W Europie planuje się budowę kolejnych laserów rentgenowskich, np. przy brytyjskim synchrotronie DIAMOND i hiszpańskim ALBA. Injektorem nowego synchrotronu MAX IV w Lund będzie akcelerator liniowy (linac), który w przyszłości przerobiony zostanie na laser na swobodnych elektronach. Tak więc, jeśli – zapatrzeni w klasyczne synchrotrony trzeciej generacji – myślimy, że spoglądamy w przyszłość, w rzeczywistości możemy oglądać się do tyłu!

Podsumowując dotychczasowe uwagi można powiedzieć, że krystalografia białek będzie przez najbliższe lata ciągle w fazie "rewolucyjnego rozwoju". Będzie to wynikiem dramatycznego postępu w metodologii pomiarowej, nadchodzącego głównie z kierunku fizyki, oraz śmiałych i wizjonerskich wyzwań rzucanych przez nauki biologiczne. W takim też sensie krystalografia utrzyma swoją rolę jako tygiel, w którym rodzą się rzeczy, "o jakich nie śniło się filozofom", czerpiący życiodajną energię ze styku nauk biologicznych i fizycznych. Jednak w tej niszy krystalografia powinna zdecydowanie trwać przy swoim chemicznym dziedzictwie. Siłą krystalografów było i będzie nadal to, że przez pryzmat struktury potrafią wnikliwie interpretować zjawiska chemiczne stanowiące podstawę procesów określanych jako życie. Parafrazując mógłbym napisać "kto posiadał umiejętność rozumienia struktury materii – ten stał się jej panem". Do roli tej bez wątpienia predestynowani są krystalografowie.

Na koniec chciałbym poruszyć dwie dodatkowe, lecz niezwykle ważne sprawy. Po pierwsze, sprawę jakości modeli strukturalnych wyznaczanych metodami krystalografii. Dzięki postępowi technicznemu i metodycznemu jakość struktur krystalograficznych staje się systematycznie coraz wyższa, co trzeba szczególnie mocno podkreślić, zważywszy, że struktury te stają się jednocześnie coraz bardziej złożone. Najogólniej rzecz ujmując, struktury makromolekularne określane są z coraz lepszymi parametrami statystycznymi (widocznymi również w jakości danych eksperymentalnych) i z coraz wyższą rozdzielczością. Mamy obecnie całkiem sporo struktur w banku PDB, które swoją jakością dorównują rutynowym strukturom małowcząsteczkowym [17], a czasem nawet je prześcigają. Zdarzają się też, na razie rzadko, perełki, jak na przykład struktury białkowe, dla których udało się ułożyć model multipolowy, tj. precyzyjnie zbadać rozkład elektronów na wiązańach chemicznych i w niesferycznie sparametryzowanych atomach [18,19]. Słyszysz się czasami opinię, że takie dokładne badania struktury białek są zbędne, gdyż odpowiedzi na podstawowe pytania udzielają już nawet bardzo zgrubne modele. Opinię taką kategorycznie odrzucam. Po pierwsze, jako uczeni mamy moralny obowiązek dociekać prawdy tak dobrze, jak to jest tylko w naszej mocy. Po drugie, uważam, że nasza siła, jako krystalografów, leży właśnie w tym, że nie ograniczamy się do enigmatycznych i mglistych modeli, ale poprzez przesuwanie granicy rozdzielczości jesteśmy w stanie budować modele bardzo precyzyjne, ukazujące struktury z prawdziwie atomową rozdzielczością. Nigdy nie wiadomo, czym może zaskoczyć nas nawet najbardziej trywialna struktura białkowa. Przy kiepskiej jakości danych, tego co nietypowe a przy tym najciekawsze – moglibyśmy po prostu nie zauważyć!

Na nic się zda przepowiadanie przyszłości krystalografii, jeśli nie zadamy o to, by w przyszłości istnieli krystalografowie. Choć zabrzmiał to kuriozalnie – możliwość takiego czarnego scenariusza jest całkiem realna. Oto krystalografia znika w szybkim tempie z programów studiów uniwersyteckich i może okazać się, że w następnym pokoleniu zabraknie fachowców nie tylko zdolnych rozwijać naszą dziedzinę, ale nawet utrzymać ją na minimalnym poziomie egzystencji [20]. Byłoby niepowetowaną stratą, jeśli za 15-20 lat istotnie zabrakłoby krystalografów, którzy mogliby realizować te wspaniałe wizje, jakie rysują się przed naszą dyscypliną. Zróbmy wszystko co w naszej mocy, aby oddalić to niebezpieczeństwo.

Literatura

- [1] M. Jaskolski, "Personal remarks on the future of protein crystallography and structural biology," *Acta Biochim. Polon.* **57** (2010) 330–337.
- [2] H.M. Berman, J. Westbrook, Z. Feng, G. Gilliland, T.N. Bhat, H. Weissig, I.N. Shindyalov, P.E. Bourne, "The Protein Data Bank," *Nucleic Acids Res.* **28** (2000) 235–242. [3] Z. Dauter, M. Jaskolski, A. Wlodawer, "Impact of synchrotron radiation on macromolecular crystallography: A personal view," *J. Synchrotron Radiat.* **17** (2010) 433–444.
- [4] M. Gilski, "Automation and remote synchrotron data collection," *Acta Phys. Polon. A* **114** (2008) 331–338.

- [5] J. Karle, "Some developments in anomalous dispersion for the structural investigation of macromolecular systems in biology," *Int. J. Quant. Chem.* **S7** (1980) 357–367.
- [6] W.A. Hendrickson, "Determination of macromolecular structures from anomalous diffraction of synchrotron radiation," *Science* **254** (1991) 51–58.
- [7] Z. Dauter, M. Dauter, E. Dodson, "Jolly SAD," *Acta Crystallogr. D* **58** (2002) 494–506.
- [8] International Human Genome Sequencing Consortium, "Initial sequencing and analysis of the human genome," *Nature* **409** (2001) 860–921.
- [9] J.C. Venter, et al., "The sequence of the human genome," *Science* **291** (2001) 1304–1351.
- [10] N. Ban, P. Nissen, J. Hansen, P.B. Moore, T.A. Steitz, "The complete atomic structure of the large ribosomal subunit at 2.4 Å resolution," *Science* **289** (2000) 905–920.
- [11] F. Schluenzen, A. Tocilj, R. Zarivach, J. Harms, M. Gluehmann, D. Janell, A. Bashan, H. Bartels, I. Agmon, F. Franceschi, A. Yonath, "Structure of functionally activated small ribosomal subunit at 3.3 Å resolution," *Cell* **102** (2000) 615–623.
- [12] B.T. Wimberly, D.E. Brodersen, W.M. Clemons Jr., R.J. Morgan-Warren, A.P. Carter, C. Vonrhein, T. Hartsch, V. Ramakrishnan, "Structure of the 30S ribosomal subunit," *Nature* **407** (2000) 327–339.
- [13] M. Selmer, C.M. Dunham, F.V. Murphy, A. Weixlbaumer, S. Petry, A.C. Kelley, J.R. Weir, V. Ramakrishnan, "Structure of the 70S ribosome complexed with mRNA and tRNA," *Science* **313** (2006) 1935–1942.
- [14] D. Bourgeois, A. Royant, "Advances in kinetic protein crystallography," *Curr. Opin. Struct. Biol.* **15** (2005) 538–547.
- [15] J. Hajdu, "Single-molecule X-ray diffraction," *Curr. Opin. Struct. Biol.* **10** (2000) 569–573.
- [16] D. Sayre, "Single-particle imaging," in: *Evolving Methods for Macromolecular Crystallography*, R.J. Read, J.L. Sussman (red.) (Springer, Dordrecht, 2007).
- [17] J. Wang, M. Dauter, R. Alkire, A. Joachimiak, Z. Dauter, "Triclinic lysozyme at 0.65 Å resolution," *Acta Crystallogr. D* **63** (2007) 1254–1268.
- [18] C. Jelsch, M.M. Teeter, V. Lamzin, V. Pichon-Pesme, R.H. Blessing, C. Lecomte, "Accurate protein crystallography at ultra-high resolution: Valence electron distribution in crambin," *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **97** (2000) 3171–3176.
- [19] B. Guillot, C. Jelsch, A. Podjarny, C. Lecomte, "Charge-density analysis of a protein structure at subatomic resolution: the human aldose reductase case," *Acta Crystallogr. D* **64** (2008) 567–588.
- [20] A. Wlodawer, W. Minor, Z. Dauter, M. Jaskolski, "Protein crystallography for non-crystallographers, or how to get the best (but not more) from published macromolecular structures," *FEBS J.* **275** (2008) 1–21.

Mail-in synchrotron powder diffraction at the APS

Brian H. Toby and Matthew R. Suchomel

Advanced Photon Source, Argonne National Laboratory, Argonne, IL- 60439, USA
e-mail: 11-BM@aps.anl.gov

As everyone in the field knows, the information obtained from a diffraction experiment is often limited by how much can be measured. This is especially true for powder diffraction experiments, where the information obtained from a powder pattern can be limited by several experimental effects. These effects may include: signal-to-noise, determined by the source intensity and ability to separate diffraction signal from air scatter and fluorescence; measurement range, limited by the source wavelength; and poor instrumental resolution, which reduces the number of observable intensity measurements due to the overlap of separate reflections.

The use of synchrotron source affords an opportunity to minimize the impact of all these limitations by offering a very intense and nearly parallel beam of high-energy X-rays. Armed with this intense beam, three-crystal diffraction optics (two-crystal monochromation combined with a perfect-crystal analyzer) can be added to enable the detection of diffraction peaks with very high resolution. The use of such a crystal analyzer design also enhances signal *vis-a-vis* background, in that fluorescence and incidental scatter is rejected, since only photons with the right energy and coming along the right path are diffracted by the analyzer. The use of high-energy X-rays allows measurements to be conducted to higher- Q values ($Q = 4\pi\sin\theta/\lambda = 2\pi/d$) and allows greater penetration into high- Z materials. The nearly parallel beam intrinsic to a synchrotron source avoids use of Bragg-Brentano focusing, with its inherent uncertainty for the location of zero for 2θ . Imprecision in $2\theta_0$ is reduced by typically two orders of magnitude with a synchrotron. Finally, synchrotron powder diffraction measurements typically employ a Debye-Scherrer transmission geometry (with a rotating capillary sample), which often minimizes problems of preferred sample orientation. However, the triple-crystal optic is very inefficient and even with the great intensity of a synchrotron source an average scan might require close to a day. For this reason, new synchrotron powder diffractometers are now constructed with anywhere from 10 to 40 sets of analyzer crystals and detectors, offering much faster data collection times of approximately 1 hour. Readers are referred to Fig. 1 for a visual A visual example of just how good a one-hour scan can be. This shows a one-hour scan of the NIST LaB₆ standard.

Thus synchrotron measurements are the preferred technique for structure determination from powder diffraction. The improved accuracy of the 2θ measurement, along with the improved ability to resolve individual peaks, greatly simplifies the task of indexing patterns for new materials. These

measurements also offer an order of magnitude better sensitivity and precision for phase detection and quantification.

A problem with synchrotron experiments can be access to the instrument. Historically, this requires writing a proposal, a delay of at many months while proposals are reviewed; and then further delay for successful proposals to be scheduled. Typically, the scientist must finally travel to the synchrotron to perform the measurements. This is expensive and time consuming. Not surprisingly, relatively few research groups perform such measurements and those that do, often have significant delays between when a material is first identified for study and when the measurements are finally made.

The Advanced Photon Source (APS) synchrotron facility at the Argonne National Laboratory has made progress in alleviating some of these problems. Nearly a decade ago, several forward-thinking scientists (lead by John Mitchell, Jim Jorgensen, and Peter Lee), proposed adding a synchrotron powder diffraction beamline at the Argonne National Laboratory's Advanced Photon Source (APS) and in that proposal they envisioned a solution to this historical barrier. They called for an instrument equipped with an industrial sample-loading robot, a barcode reader, and cryo-cooling/heating device so that unattended powder diffraction measurements, even at non-ambient temperatures, could be performed. An engineering model for the instrument is shown in Fig. 2. They also proposed that access to the instrument could be provided without the need for users to come to the beamline. Their proposal was funded by the US Department of Energy and the APS beamline 11-BM was selected for its location. The prospect of offering scientific access to this instrument was sufficient to attract one of us (BHT) to oversee its construction and design the workflow and the other (MRS) to oversee its operation.

Fast-forward to today; the 11-BM powder diffraction instrument is operational and available to users from around the world. Access can be made without travel ("mail-in access") for short experiments that meet certain criteria, or with travel to the APS ("on-site access") for more complex or longer experiments. Proposals from potential users are required in either case, but mail-in users may submit via a rapid access process, which removes the long delay for the proposal review and scheduling. Extensive information about the beamline and how to obtain access to its user program can be found on website <http://11bm.xor.aps.anl.gov/>. Experiments suitable for mail-in are cases where:

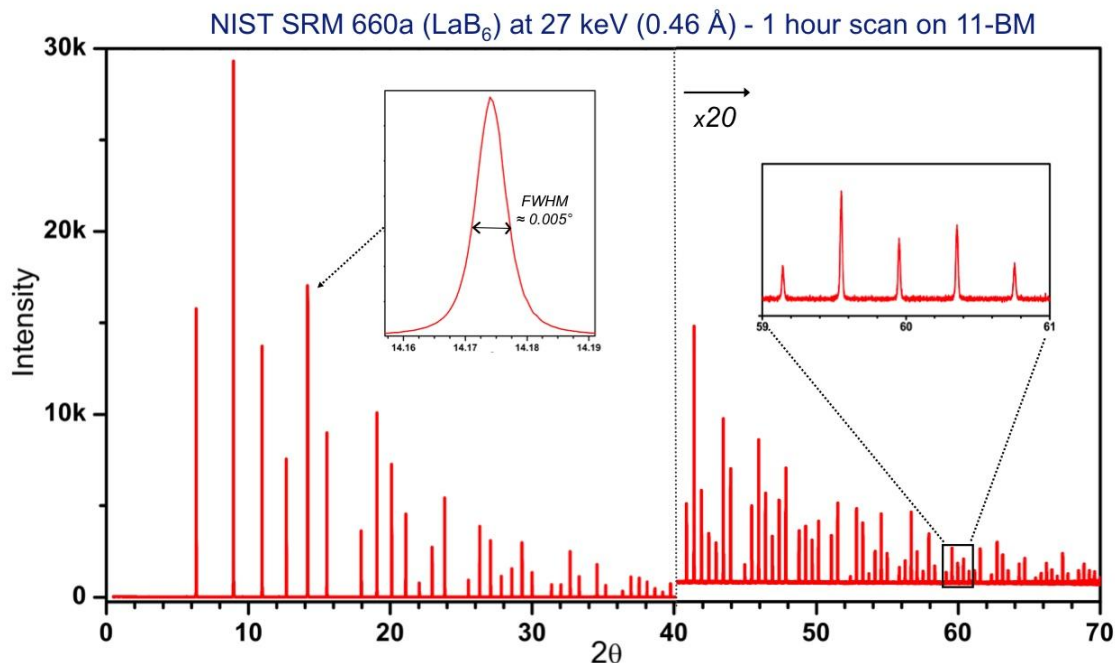
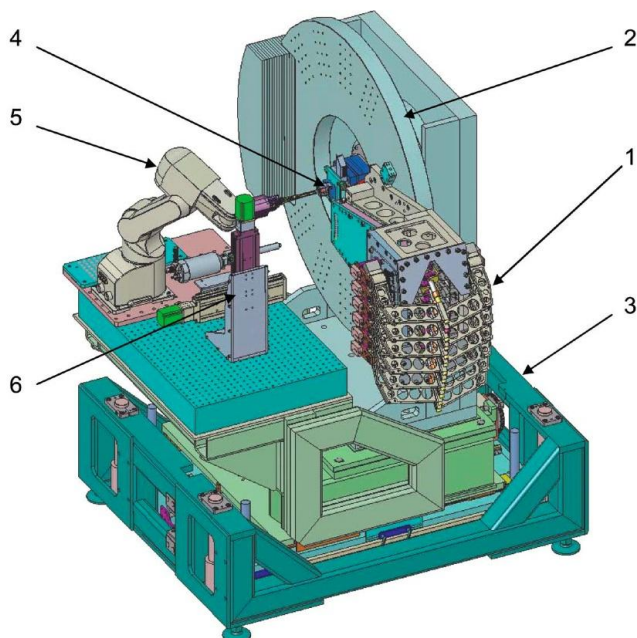


Figure 1. A scan of the NIST 660a LaB₆ Standard Reference Material, where data were collected in one hour of the APS 11-BM diffractometer. Sections of the diffraction pattern have been enlarged to show additional detail. Vertical axis shows the approximate number of counts collected at each angle.



11-BM Diffractometer Schematic: (1) 12-analyzer detector system, (2) two-circle goniometer, (3) supporting table, (4) sample stages, (5) sample mounting robot, (6) the sample environment positioning device that allows the cryostream to move out of the way of the robot.

Figure 2. An engineering schematic of the 11-BM diffractometer showing (1) the 12-analyzer detection system, (2) the two-circle vertical goniometer, (3) the supporting table with vertical and lateral motion adjustments, (4) the modular sample mounting stage, (5) the sample mounting robot and (6) the sample environment positioning device that allows the cryostream to move out of the way of the robot.

- 1) shipping the material does not present a hazard,
- 2) measurements can be completed in 8 samples or < 8 hours,
- 3) scan temperatures are between 100 K and 450 K, and
- 4) where data collection conditions can be planned in advance and order of measurements is not important.

In contrast, if review of one measurement is needed to plan the next, or where a sample heating or cooling protocol must be used, this defines an experiment that needs an on-site participant on-site at the beamline. Likewise, use of the more complex equipment needed to cool samples to below 100 K or to heat up to 950 C is only accessible to on-site users.

For mail-in use, the user must prepare the sample(s) using a kit and instructions provided by the beamline. This is described in more detail on the beamline website. All mail-in measurements are made at ~30 KeV (~0.4 Å); the user has some discretion on data collection parameters.

The beamline web site also provides copious information on how to submit a proposal for use of the APS and on how the mail-in submission process works. One suggestion to interested readers is that they investigate if their institution has a signed agreement in place for access to the APS (a "User Agreement") early in the process. This is a legal document and it is required that the lead institution on every proposal must have this agreement in place to access our facility. This is required for both mail-in and on-site access, and can be time consuming to process depending on your institution's requirement.

Readers of this newsletter may be pleased to note that the US does not prioritize access to APS facilities by scientists from any particular country. We wish to encourage access to users, both domestic and international, who will perform the best

science and will publish their results to the greater community. However, overseas mail-in users must abide by a few additional constraints. They must handle all paperwork to have their samples shipped into the US (we do not sufficient resources to respond to U.S. Customs or 3rd party shippers; as such, all such requests will be directed to the shipper.) Likewise, return shipping of samples to addresses outside the U.S. is not available. More information can be obtained on the webpage or by contacting beamline staff.

In addition to the extensive information on the beamline web site, the reader is also referred to three papers [1-3] that have been published describing the detector system, the instrumental performance and the automation design.

References

- [1] P.L. Lee, D. Shu, M. Ramanathan, C. Preissner, J. Wang, M.A. Beno, R.B. Von Dreele, L. Ribaud, C. Kurtz, S.M. Antao, X. Jiao, B.H. Toby, "A twelve-analyzer detector system for high-resolution powder diffraction," *J. Synchrotr. Radiat.* **15** (5) (2008) 427-432.
- [2] J. Wang, B.H. Toby, P.L. Lee, L. Ribaud, S. Antao, C. Kurtz, M. Ramanathan, R.B. Von Dreele, M.A. Beno, "A dedicated powder diffraction beamline at the Advanced Photon Source: Commissioning and early operation results," *Rev. Sci. Instrum.* **79** (2008) 085105-1-5.
- [3] B.H. Toby, Y. Huang, D. Dohan, D. Carroll, X. Jiao, L. Ribaud, J.A. Doebbler, M.R. Suchomel, J. Wang, C. Preissner, D. Kline, T.M. Mooney, "Management of metadata and automation for mail-in measurements with the APS 11-BM high-throughput, high-resolution synchrotron powder diffractometer," *J. Appl. Crystallogr.* **42** (6) (2009) 990-993.

Dwudziestolecie Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego – rocznicowe impresje

Andrzej Kisiel

Instytut Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego, ul. Reymonta 4, 30 059 Kraków

W lutym bieżącego roku upłynęło 20 lat od inicjatywy utworzenia Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego (PTPS). Ta rocznica jest wdzięczną okazją do zadumy i przypomnienia niektórych wydarzeń sprzed 20 lat, jak również krótkiego prześledzenia wzrostu zainteresowania badaniami z użyciem promieniowania synchrotronowego w Polsce i w świecie w okresie poprzedzającym powstanie PTPS. Entuzjazm, z którym podejmowaliśmy decyzję o utworzeniu Towarzystwa i dążeniu do jego rozwoju, trwa do dnia dzisiejszego. Napawa to uzasadnionym optymizmem na przyszłość.

Zainteresowanie niezwykle cennymi własnościami fizycznymi promieniowania synchrotronowego i możliwością stosowania jego w badaniach fazy skondensowanej narodziło się z początkiem lat pięćdziesiątych ubiegłego stulecia, w badaniach prowadzonych bezpośrednio po wybudowaniu w roku 1947 w laboratorium General Electric Research w stanie Nowy York (USA) pierścienia, synchronicznego akceleratora przyspieszającego elektrony do energii 70 MeV [1]. Rozpoczęte wówczas badania niezwykle cennych cech fizycznych tego promieniowania w bardzo krótkim czasie zaowocowały wieloma ważnymi zastosowaniami promieniowania synchrotronowego w spektroskopii optycznej, rentgenowskiej i w szeroko pojętej spektroskopii fotoemisyjnej a także w dyfrakcji i tomografii rentgenowskiej. W wyniku tego rozwoju już na początku lat osiemdziesiątych zastosowania promieniowania synchrotronowego w skali światowej konsumowały rocznie milion godzin pracy różnych stacji pomiarowych usytuowanych przy synchrotronach elektronowych i pierścieniach akumulacyjnych. Dziesięć lat później, w roku 1990, globalna liczba godzin pracy tych urządzeń podwoiła się. W światowym wyścigu użytkowania promieniowania synchrotronowego w badaniach naukowych miało również swój udział polskie środowisko naukowe.

Rozwój w Polsce badań naukowych z użyciem promieniowania synchrotronowego, wiązał się mocno z rozwojem stałej współpracy z licznymi zagranicznymi ośrodkami synchrotronowymi a także z tworzeniem sprzyjającej atmosfery w polskim środowisku naukowym wokół stosowania promieniowania synchrotronowego w fizyce ciała stałego. W latach siedemdziesiątych bardzo istotnym i ówczesnie aktualnym problemem była potrzeba zmodyfikowania przekonania (dość powszechnego w

światowym a także polskim środowisku naukowym), że spośród uprawianych dziedzin fizyki tylko niektóre wymagają wysokich nakładów finansowych. Do tych wyróżnionych dziedzin należały wtedy kriogenika i badania z zakresu fizyki jądrowej i fizyki wysokich energii. Stosowanie w fizyce jądrowej i w fizyce wysokich energii bardzo kosztownych akceleratorów cząstek oraz skomplikowanej i drogiej aparatury pomiarowej, wynikało z potrzeby pogłębienia rezultatów badań z pierwszej połowy XX wieku, fundamentalnych dla poznania własności jądra atomowego. Ważnym i powszechnie akceptowanym wyjątkiem było stosowanie reaktorów neutronowych w badaniach z fizyki i fizyko-chemii ciała stałego. Przekonanie decydentów, że inne badania w dziedzinie fizyki, chemii, biologii i medycyny mogą potrzebować również bardzo dużych nakładów finansowych, wymagało czasu i przekonującej argumentacji. W Europie Zachodniej, Stanach Zjednoczonych i Japonii już w latach sześćdziesiątych ubiegłego stulecia ważne potrzeby rozwoju fizyki i chemii ciała stałego przebiły się do świadomości budowniczych wielkich akceleratorów elektronowych, konstruowanych dotychczas jedynie dla potrzeb fizyki jądrowej. Powstały wówczas synchrotrony elektronowe, tzw. synchrotrony drugiej generacji, służące równocześnie potrzebom fizyki jądrowej i fizyki cząstek elementarnych oraz zastosowaniom promieniowania synchrotronowego w fizyce i chemii ciała stałego. Dopiero z końcem lat siedemdziesiątych ubiegłego stulecia zaczęły powstawać źródła promieniowania synchrotronowego trzeciej generacji przeznaczone wyłącznie do badań materii fazy skondensowanej. W tym okresie również w Polsce, jednym z istotnych zadań środowiska nauk przyrodniczych stało się budowanie świadomości nowych potrzeb badawczych.

Najwcześniejsze zainteresowanie w Polsce zastosowaniem promieniowania synchrotronowego do badań w fizyce ciała stałego pojawiło się w pierwszej połowie lat siedemdziesiątych ubiegłego stulecia w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego. Dotyczyło ono rozpoczętych przeze mnie w roku 1974, wspólnych badań z włoską grupą *Solidi Roma* [2]. Badania te dotyczyły spektroskopii optycznej ciała stałego z zastosowaniem promieniowania synchrotronowego pochodzącego z ówczesnie największego na świecie synchrotronu elektronowego o energii elektronów 1,1 GeV, usytuowanego w Frascati w pobliżu Rzymu. Uruchomiony w roku 1958 synchrotron elektronowy, jako

inwestycja Narodowego Komitetu Energii Jądrowej (Comitato Nazionale di Energia Nucleare) Republiki Włoskiej był akceleratorem przeznaczonym pierwotnie wyłącznie do badań w fizyce jądrowej, lecz w wyniku spodziewanych nowych, unikalnych zastosowań został w roku 1967 częściowo przebudowany i przystosowany również do badań z zakresu fizyki ciała stałego. Przy modyfikacji synchrotronu uczestniczyła utworzona do tego celu w roku 1972 Grupa *Solidi Roma*, kierowana przez profesorów Instytutu Fizyki Uniwersytetu Rzymskiego „La Sapienza” Franco Bassaniego i Gianfranco Chiarottiego. Pierwsze nasze wspólne publikacje z tych badań ukazały się w roku 1977. Dotyczyły one przygotowania i diagnostyki cienkich warstw palladu przeznaczonych do badań spektroskopowych z użyciem promieniowania synchrotronowego w zakresie energii 10 – 200 eV. Również w tym samym roku ukazał się w *Postęпах Fizyki*, napisany przeze mnie, pierwszy polskojęzyczny artykuł przeglądowy o zastosowaniu promieniowania synchrotronowego w spektroskopii optycznej próżniowego nadfioletu. Według sporządzonego przez PTPS spisu publikacji prac naukowych wykonanych z zastosowaniem promieniowania synchrotronowego przez polskich autorów afiliowanych w polskich placówkach naukowych, kolejni polscy autorzy pojawili się dopiero na początku lat osiemdziesiątych ubiegłego stulecia. Ukazały się wtedy prace spektroskopowe Jarosława Chrostowskiego (1980) i Rajmunda Trykozki (1981) z Instytutu Fizyki Politechniki Warszawskiej.

Od początku współpracy naukowej Instytutu Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego z włoską grupą *Solidi Roma* trwały wspólne poszukiwania możliwości nawiązania ścisłej formalnej współpracy naukowej, umożliwiającej regularne kontakty obydwu grup. Nieocenione zasługi miał w tym względzie prof. Franco Bassani, bardzo wysoko ceniony w świecie naukowym teoretyk fizyki ciała stałego, który przez wiele lat był głównym animatorem współpracy włosko-polskiej w zakresie użytkowania promieniowania synchrotronowego do badań w fizyce ciała stałego. Partnerska współpraca Instytutu Fizyki UJ z Instytutem Fizyki Uniwersytetu Rzymskiego i z grupą *Solidi Roma* rozpoczęła się na przełomie roku 1974 i 1975, gdy po sześciomiesięcznej mojej wizycie, na zaproszenie Narodowego Instytutu Fizyki Jądrowej (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare) i rewizytach w Krakowie profesorów Franco Bassaniego i Gianfranco Chiarottiego oraz dr Adalberto Balzarottiego, został sformułowany wspólny szczegółowy plan badań. Program ten dotyczył analizy z użyciem promieniowania synchrotronowego własności optycznych bardzo wysokiej jakości binarnych i potrójnych monokryształów związków półprzewodnikowych, dostarczanych przez profesorów Witolda Giriata i Andrzeja Mycielskiego z Instytutu Fizyki PAN w Warszawie, oraz prowadzenie badań teoretycznych struktury elektronowej półprzewodników. W wyniku kilkuletnich starań, w październiku 1979 r. została podpisana w Krakowie formalna umowa o współpracy bezpośredniej pomiędzy Uniwersytetem Jagiellońskim i Uniwersytetem Rzymskim „La Sapienza”. Umowa ta przewidywała wspólne badania w fizyce ciała stałego Instytutów Fizyki obydwu uczelni w zakresie użytkowania promieniowania

synchrotronowego z pierścienia akumulacyjnego ADONE, w ramach w programu PULS (Progetto per Utilizzazione della Luce di Sincrotrone). Za poprawną realizację dołączonego w aneksie programu specjalistycznie potraktowanych zadań badawczych w fizyce półprzewodników odpowiadałem wspólnie z Prof. F. Bassaninim. Warto zauważyć, że ta polsko-włoska umowa o współpracy bezpośredniej była pierwszym formalnym porozumieniem, zawartym przez polską instytucję naukową, w zakresie wykorzystania promieniowania synchrotronowego w fizyce ciała stałego.

W wyniku zawartego pod koniec roku 1979 porozumienia czteroosobowa grupa z Pracowni Spektroskopii Półprzewodników Zakładu Fizyki Ogólnej Uniwersytetu Jagiellońskiego [3] wspólnie z grupą włoską, zapoczątkowała, w ramach programu PULS, badania struktury lokalnej dla kilku kryształów związku (Cd,Mn)Te z manganem, dostarczonych przez prof. W. Giriata, przy użyciu analizy EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure), wykorzystując promieniowanie synchrotronowe z 1,5 GeV pierścienia akumulacyjnego ADONE we Frascati. Po dwuletnich badaniach eksperymentalnych bardzo interesujące nowe rezultaty zostały zaprezentowane w roku 1982 na *International Conference on EXAFS and Near Edge Structure* we Frascati. Pełne wyniki badań doświadczalnych wraz z modelem teoretycznym, nazywanym później w literaturze przedmiotu modelem sztywnych kationów, zostały opublikowane w *Physical Review* w roku 1984. W ramach rokrocznie odnawianej umowy polsko-włoskiej, ścisła współpraca naukowa rozwijała się bardzo pomyślnie w zakresie badań spektroskopii optycznej w próżniowym nadfiolecie, analizy EXAFS i XANES dla wielu związków półprzewodnikowych. Współpraca trwała nieprzerwanie do roku 2002 i zaowocowała blisko setką wspólnych publikacji i wieloletnią przyjaźnią członków grupy polsko-włoskiej.

W polskim środowisku naukowym szersze zainteresowanie zastosowaniem promieniowania synchrotronowego pojawiło się dopiero po 1985 roku. Wtedy zaczęła gwałtownie rosnąć liczba osób zainteresowanych różnymi rodzajami badań w Uniwersytetach: Jagiellońskim, Warszawskim i Śląskim, Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie oraz w Instytutach Fizyki PAN w Warszawie, Fizyki Jądrowej w Krakowie i Fizyki Jądrowej w Świerku. Instytucje te delegowały swoich pracowników na badania do różnych ośrodków synchrotronowych, a niektóre z nich zawarły bilateralne umowy o współpracy z dyrekcjami źródeł promieniowania synchrotronowego.

W latach osiemdziesiątych ubiegłego stulecia rosnące zapotrzebowanie w świecie na badania naukowe fazy skondensowanej z użyciem promieniowania synchrotronowego wyrażało się organizowaniem przez ośrodki badawcze szeregu międzynarodowych konferencji i sympozjów w Europie, USA i Japonii. Wzrosło wówczas również dążenie do zacieśniania współpracy rozproszonych grup badaczy różnych specjalności. Wyrazem tego dążenia była ważna inicjatywa utworzenia Europejskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego (*European Synchrotron Radiation Society* (ESRS)) podjęta w czasie trwania *Drugiej Europejskiej Konferencji o Postępie w*

Rentgenowskich Badaniach Promieniowaniem Synchrotronowym [2nd European Conference on Progress in X-Ray Synchrotron Radiation Research (1988)] w Rzymie. ESRS zostało formalnie zarejestrowane we Francji i rozpoczęło działalność dopiero w grudniu 1990 r. Podstawowym celem statutowym Towarzystwa było wszechstronne informowanie i ułatwianie współpracy międzynarodowej użytkownikom promieniowania synchrotronowego. Niżej podpisany, uczestniczący w tej konferencji w Rzymie, został jednym z członków założycieli ESRS a następnie przedstawicielem Polski w pierwszej dwuletniej kadencji Zarządu ESRS. Kolejnymi przedstawicielami Polski zostali od 1992 r. nieżyjący już Jacek Grochowski ze Środowiskowego Laboratorium Analiz Fizyko-chemicznych i Badań Strukturalnych UJ a od 1994 r. Krystyna Ławniczak-Jabłońska z Instytutu Fizyki PAN. Niestety, ESRS po około sześciu latach aktywności i po zorganizowaniu dwu międzynarodowych konferencji, praktycznie zakończyło działalność ze względów ekonomicznych.

Wraz ze wzrostem liczby polskich użytkowników promieniowania synchrotronowego, zaistniała również potrzeba zacieśniania współpracy tego jeszcze niewielkiego środowiska naukowego, użytkującego promieniowanie synchrotronowe z różnych akceleratorów w Europie, USA i Japonii. Fizycy i chemicy oraz współpracujący z nimi lekarze i biologowie zaczęli wyrażać potrzebę większej integracji polskiego środowiska naukowego. W lutym 1991 r. przy wsparciu finansowym i organizacyjnym Instytutu Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego [4], wspólnie z nieżyjącym już prof. Julianem Auleytnerem, zorganizowaliśmy w Krakowie w pałacyku Szyszko Bogusza Pierwsze Krajowe Sympozjum Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego. Na Sympozjum wygłoszono 25 piętnastominutowych komunikatów z badań prowadzonych przez polskich badaczy z użyciem promieniowania synchrotronowego. W czasie pożegnalnej kolacji przy płonącym kominku, uczestnicy Sympozjum zadeklarowali chęć utworzenia Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego. Wśród 28 członków założycieli Towarzystwa tworzyli większość gospodarze Sympozjum, reprezentanci Instytutu Fizyki PAN w Warszawie oraz Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. W maju 1991 r., czyli zaledwie pół roku od formalnej rejestracji ESRS we Francji, PTPS zostało zarejestrowane i rozpoczęło działalność z wyraźnie nakreślonymi zadaniami. Zadania te, zawarte częściowo w statucie ESRS, dotyczyły dwu podstawowych aspektów; (1) starań o łatwiejszy dostęp polskich użytkowników do źródeł promieniowania synchrotronowego oraz (2) podnoszenia kwalifikacji naukowych członków Towarzystwa. Ciekawym ewenementem był fakt, że PTPS był pierwszym utworzonym w Europie narodowym towarzystwem promieniowania synchrotronowego, mimo że Polska nie posiadała własnego synchrotronu i nie miała wtedy żadnych realnych perspektyw posiadania własnego źródła promieniowania synchrotronowego.

Zgodnie z wytyczonymi zadaniami statutowymi, bezpośrednio po rejestracji PTPS Zarząd Towarzystwa

rozważał możliwości zmierzające do uzyskania stałego dostępu polskich użytkowników do źródeł promieniowania synchrotronowego. Wspólnie z Prof. Julianem Auleytnerem złożyliśmy, w imieniu PTPS Memoriał, poparty przez JM Rektora UJ prof. Andrzeja Pelczara, na ręce Sekretarza Komitetu Badań Naukowych dr Krzysztofa Frąckowiaka. Memoriał wyrażał potrzeby badawcze polskich użytkowników promieniowania synchrotronowego oraz zawierał ponadto sugestie dotyczące przystąpienia Polski do budującego się Europejskiego Centrum Promieniowania Synchrotronowego (ESRF) w Grenoble. Jednocześnie tekst Memoriału został wysłany do Ministerstwa Edukacji Narodowej oraz szeregu Uniwersyteckich Instytutów Naukowych i Instytutów PAN z prośbą o poparcie starań. Zawarta w Memoriale sugestia przystąpienia Polski do ESRF była wprawdzie mało realistyczna, ze względu na koszt członkostwa w ESRF przekraczający ówczesne możliwości finansowe Polski. Mimo to prowadziliśmy wspólnie z prof. J. Auleytnerem i Sekretarzem KBN oraz prof., Ruprechtem Hensem dyrektorem ESRF wstępne rozmowy na temat uzyskania korzystniejszych warunków finansowych przystąpienia Polski do ESRF. Obniżenie przez ESRF w roku 1996 minimalnej składki członkowskiej do jednoprocenowego wkładu oraz dopuszczenie możliwości członkostwa konsorcjum złożonego z kilku państw w ramach tej jednoprocenowej składki, umożliwiły ponowne podjęcia starań o członkostwo Polski w ESRF.

Niemal równolegle z rozmowami w sprawie przystąpienia Polski do ESRF rozpoczęliśmy rozmowy rekonesansowe z dyrekcją synchrotronu ELETTRA w Trieście na temat budowy polskiej linii pomiarowej przy nowo uruchamianym synchrotronie. Idea ta uzyskała gorące poparcie Podkomisji Metod Jądrowych w Fizyce Fazy Skondensowanej Państwowej Agencji Atomistyki i bardzo przyjaźnie nastawionego do polaków dyrektora naukowego synchrotronu ELETTRA prof. Georgio Margaritondo. Warunki ekonomiczne budowy samodzielnej linii były korzystne, bo należało zbudować linię pomiarową jednorazowym kosztem ok. 1,5 miliona \$ i pokrywać roczne stosunkowo niewielkie koszty eksploatacyjne. Niestety, starania nie przyniosły jednak pożądanego rezultatu, gdyż ubogie państwo Polskie nie było jeszcze w stanie finansować tak kosztownego przedsięwzięcia.

Zostały zapoczątkowane również rozmowy dotyczące ułatwienia dostępu do źródeł promieniowania synchrotronowego w obrębie międzynarodowego programu ASTRON [5]. Wprawdzie Program ten dotyczył głównie współpracy w zakresie neutronowych badań fazy skondensowanej, lecz od roku 1993 w ramach tego Programu została podjęta inicjatywa, aby kraje Europy Centralnej tzn. Austria, Czechy, Polska, Słowacja, Słowenia i Węgry wspólnie utworzyły konsorcjum umożliwiający tym krajom użytkowanie promieniowania synchrotronowego. Dyskusja nad tą inicjatywą nabrała tempa po roku 1996, gdy ESRF obniżyło wysokość składki do 1% i dopuściło możliwość tworzenia wielonarodowego członkostwa ESRF w postaci Współpracujących Grup Badawczych (Research Collaborating Group). W październiku 1997 roku PTPS

skierowało do Prezydium KBN kolejny Memoriał w sprawie przystąpienia Polski do ESRF na nowo sformułowanych warunkach. Równocześnie rozpoczęliśmy wstępne rozmowy w ramach zespołu o nazwie CENTRALSYNC, stowarzyszającego wymienione powyżej kraje Europy Centralnej. Zespół ten w fazie oficjalnych rozmów z ESRF miał przekształcić się w konsorcjum reprezentujące wymienione kraje we władzach ESRF. Po wycofaniu się Słowenii z prac CENTRALSYNC, przedstawiciele Austrii, Czech, Polski, Słowacji i Węgier na trzech kolejnych spotkaniach w Budapeszcie w roku 1997, w Krakowie w Collegium Novum Uniwersytetu Jagiellońskiego w październiku 1998 roku i Pradze w listopadzie 1999 roku, zakreślili ramy organizacyjne tworzonego konsorcjum. W trakcie trwających uzgodnień swój udział zawiesiły Austria i Słowacja i wobec tego zostało uzgodnione z pozostałymi sygnatariuszami CENTRALSYNC, że wkłady członkowskie do ESRF będą odpowiednio wynosić dla Czech i Węgier około 20% a dla Polski 60% jednoprocenowego wkładu członkowskiego. W ślad za Memoriałem przesłanym do KBN w październiku 1997 r., w lutym 1998, r. PTPS ponowiło starania u Ministra Nauki, Przewodniczącego KBN prof. Andrzeja Wiszniewskiego. W wyniku negocjacji i wymianie pism określających stanowiska PTPS i KBN, nasze starania spotkały się z dużą przychylnością władz KBN. Prof. Andrzej Wiszniewski wprowadził w maju 1999 roku pod obrady Prezydium Komitetu Badań Naukowych sprawę przystąpienia Polski do ESRF. Po dyskusji wspieranej bardzo przekonującymi argumentami wiceprzewodniczącego KBN prof. Andrzeja Kajetana Wróblewskiego, czołowego reprezentanta środowiska fizyki wysokich energii, wniosek PTPS dotyczący celowości starań o przystąpienie Polski do Europejskiego Centrum Promieniowania Synchrotronowego przedstawiony na tym posiedzeniu przez niżej podpisanego, ówczesnie Przewodniczącego PTPS, uzyskał jednogłośnie poparcie Prezydium KBN. Środki finansowe przyznane w roku 2000 przez Ministerstwo Finansów z rezerwy celowej wydatków budżetowych uprawnili PTPS do wszczęcia oficjalnych negocjacji z władzami ESRF. Przebiegające bardzo pomyślnie negocjacje z ESRF zostały niestety wstrzymane ze względu na pojawienie się trudności formalno-prawnych, uniemożliwiających terminowe zawarcie umowy z ESRF oraz zamrożenie środków finansowych spowodowane wzrostem deficytu budżetowego Państwa (tzw. dziura Bauca). Czechy i Węgry, które uzyskały odpowiednie środki finansowe od swoich rządów, zawarły w roku 2000 niezależne umowy z ESRF. Ostatecznie w roku 2004 polska umowa o Współpracującej Grupie Badawczej z ESRF została zawarta, już bez udziału Czech i Węgier, pomiędzy Instytutem Fizyki PAN w Warszawie i ESRF. Podpisanie tej umowy było wysoce satysfakcjonującym finałem wieloletnich starań i negocjacji PTPS o członkostwo Polski w Konsorcjum ESRF w Grenoble. W ramach tej Umowy do końca czerwca 2011r. szereg grup badawczych z Polski korzystało z promieniowania synchrotronowego i bardzo nowoczesnych, wyspecjalizowanych linii pomiarowych ESRF. Niestety, kolejne problemy formalno-prawne uniemożliwiają kontynuację wymienionej Umowy z ESRF.

W trakcie trwania negocjacji o członkostwo Polski w ESRF oraz tworzenia konsorcjum z Czechami i Węgrami, w październiku 1998 roku, grono profesorów z Instytutu Fizyki UJ i AGH wystąpiło do KBN o utworzenie Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego i budowę synchrotronu elektronowego jako źródła promieniowania synchrotronowego przeznaczonego do badań w fizyce, chemii, biologii, medycynie i naukach technicznych. Inicjatywa ta została gorąco poparta przez PTPS, choć istniały uzasadnione obawy, że powstrzyma ona nasze starania o członkostwo polskiego środowiska naukowego w ESRF. Na szczęście obydwie przedsięwzięcia zakończyły się sukcesem. Polscy użytkownicy promieniowania synchrotronowego przez 7 lat korzystali z nadzwyczaj nowoczesnych urządzeń w Grenoble, a na kampusie Uniwersytetu Jagiellońskiego będzie budowany synchrotron elektronowy przeznaczony do badań materii skondensowanej.

Nadzwyczaj ważnym celem zapisanym w statucie Towarzystwa było podnoszenie kwalifikacji naukowych członków Towarzystwa. Cel ten został w pełni osiągnięty przez bezpośredni kontakt członków i sympatyków PTPS w czasie organizowanych przez Towarzystwo szkół i sympozjów z przedstawicielami kilku różnych ośrodków Europy, USA i Japonii, z którymi współpracowali poprzednio członkowie Towarzystwa. Niezbitym dowodem żywotności PTPS są obecnie bardzo zaawansowane przygotowania programu naukowego XI International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS-11), która odbędzie się w roku 2012 w Krakowie. Ta Szkoła i Sympozjum jest kontynuacją Pierwszej Szkoły i Sympozjum Zastosowań Promieniowania Synchrotronowego w Naukach Przyrodniczych (ISSRNS-1) zorganizowanej w Jaszowcu w maju 1992 roku. Warto przypomnieć, że początki działalności Towarzystwa były niełatwe. Pierwsza Szkoła i Sympozjum została zorganizowana dla jeszcze nielicznej grupy członków Towarzystwa, z udziałem ponad 20 wykładowców z zagranicy, głównie kierowników grup badawczych z którymi współpracowali badacze z Polski. Entuzjazm organizatorów kolejnych Szkół oraz poziom i różnorodność tematyki sprawiał, że uczestnikami bywali również młodzi pracownicy naukowci i studenci przysyłani z europejskich laboratoriów synchrotronowych. Formuła szkół i sympozjów odbywających się w odstępach dwuletnich została powszechnie zaakceptowana i uznana za optymalną. W roku 2010 odbyła się już 10. szkoła i sympozjum (ISSRNS-10) z udziałem ponad 120 uczestników. Na tej Szkole i kilku poprzednich, ze względu na nabyte już bogate doświadczenie część wykładów prowadzili uczeni polscy. W celu umocnienia w PTPS wzajemnych kontaktów i przeglądu aktywności naukowej członków, od roku 1993 spotykamy również się co dwa lata na Sympozjach Krajowych (wymienne z ISSRNS).

Na Uniwersytecie Jagiellońskim, dzięki aktywności władz rektorskich i prężności krakowskiego środowiska naukowego, jest realizowany obecnie projekt "Narodowe Centrum Promieniowania Elektromagnetycznego dla Celów Badawczych", rozpoczyna się na kampusie UJ budowa polskiego synchrotronu elektronowego a utworzone również z

udziałem PTPS zespoły badawcze projektują przyszłe linie pomiarowe. Ten stan jest już niewątpliwie wielkim sukcesem, który w przynajmniej w części zawdzięczamy wcześniejszym działaniom w Uniwersytecie i poza nim. Na te sukcesy złożyła się bez wątpienia blisko czterdziestoletnia aktywność badawcza prowadzona z użyciem promieniowania synchrotronowego w Krakowie w Instytucie Fizyki UJ, a następnie w innych Instytutach oraz Zakładach Fizyki wyższych uczelni i PAN PAN w Warszawie i w szeregu innych miast Polski. Zaslęgi nie do przecenienia miała dwudziestoletnia działalność Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego, która uświadomiła polskiemu środowisku naukowemu nauk przyrodniczych i technicznych, często sceptycznie odnoszącemu się do budowy i eksploatacji bardzo kosztownych inwestycji badawczych, jak niezbędna jest potrzeba posiadania bezpośredniego dostępu do źródeł promieniowania synchrotronowego w dynamicznie rozwijających się badaniach naukowych i ich zastosowaniach w technice. Równie istotny wpływ miała rzetelna działalność edukacyjna prowadzona od dwudziestu lat przez Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego z wyobraźnią i z rozmachem. PTPS rozpoczynało działalność z grupą trzydziestu kilku entuzjastów użytkowania promieniowania synchrotronowego, a zrzesza obecnie ponad 120 osobową grupę nadzwyczaj prężnych naukowo osób, członków i sympatyków Towarzystwa. Przygotowanie pokażnej liczby wysoko wykwalifikowanych użytkowników promieniowania synchrotronowego jest rękojmią, że programy badawcze oczekujące na zakończenie budowy synchrotronu będą posiadały wysoką rangę naukową i będą mogły być realizowane z pełnym sukcesem.

Referencje

- [1] B. Orlowski „60 rocznica pierwszej obserwacji promieniowania synchrotronowego”, *Synchrotr. Radiat. Nat. Sci. (Bull. Polish Synchrotr. Radiat. Soc.)* 5, (3) (2006) 142.
- [2] Trzon zespołu eksperymentalnego *Solidi Roma* stanowili: F. Bassani, A. Bianconi, G. Chiarotti, i M. Piacentini z Instytutu Fizyki Uniwersytetu Rzymskiego "La Sapienza", E. Burattini z Laboratoria Nazionali di Frascati, oraz M. Grandolfo z Istituto Nazionale di Sanita i (dane z książki jubileuszowej Vincenzo Valente "Strada del Sincrotrone km 12 50 anni di acceleratori e particelle nei laboratoria di Frascati" ed. Istituto Nazionale di Fisica Nucleare 2007, str. 71).
- [3] M.T. Czyżyk, A. Kisiel, M. Podgórný, i M. Zimnal-Starnawska oraz nasi włoscy współpracownicy A. Balzarotti i N. Motta.
- [4] Główny ciężar organizacji Sympozjum spoczął na moich kolegach z Zakładu Fizyki Ogólnej Dorocie Dębowskiej, Ewie Czarneckiej-Such, Józefie Oleszkiewicz, Andrzej Rodziku i Marcie Zimnal-Starnawskiej. Zostali oni obok kilku innych osób z Uniwersytetu Jagiellońskiego i Instytutu Fizyki Jądrowej w Krakowie również członkami założycielami tworzonego Towarzystwa.
- [5] Program ASTRON należał do Środkowo-Europejskiego Hexagonal Center of Excellence.

Jubileusz 20-lecia Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego

Danuta Żymierska i Bronisław A. Orłowski

Instytut Fizyki PAN, al. Lotników 32/46, 02-668 Warszawa

W bieżącym roku Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego (PTPS) obchodzi dwudziestolecie. Jest to jedno z pierwszych niezależnych Towarzystw w Polsce. Utworzenie takiego towarzystwa stało się możliwe dopiero po przemianach w 1989 roku. Jubileusz będziemy świętować w trakcie 9. Krajowego Sympozjum Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego w Warszawie od 25. do 27. września. Poprzedni jubileusz, piętnastolecie, obchodziliśmy w czerwcu 2006 roku w Zakopanem w trakcie 8th *International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science*. Odsyłamy Państwa do dwóch okolicznościowych artykułów: „We are fifteeners!!! 15 years of Polish Synchrotron Radiation Society” Krystyny Jabłońskiej i „Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego” Danuty Żymierskiej, które ukazały się w tomie 5 nr 1-2 (2006) Biuletynu PTPS. Nie chcielibyśmy tutaj powtarzać zawartych w nich informacji. Na dwudziestolecie Towarzystwa opracowano pod redakcją kolegów Bogdana Kowalskiego, Wojciecha Paszkowicza i Edwarda A. Görlicha w języku polskim skrypt o technikach wykorzystujących promieniowanie synchrotronowe, który został wydany nakładem PTPS. Planujemy w przyszłości na jego podstawie opracować monografię na temat technik synchrotronowych.

O inicjatywie powołania Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego i jego początkach pisze w tym numerze Biuletynu prof. Andrzej Kisiel. Zachęcamy też do ponownego przeczytania artykułu śp. prof. Juliana Auleytnera p.t. „Moje uwagi dotyczące historii utworzenia Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego” opublikowanego w tomie 1, nr 1 (2002) Biuletynu PTPS. Znaczącą rolę w doprowadzeniu starań do szczęśliwego finału odegrali profesorowie Auleytner z IF PAN i Kisiel z UJ oraz Paweł Tomaszewski z INTiBS, który dostarczył wzór statutu i Ewa Czarnecka-Such z UJ, dzięki której Towarzystwo zostało zarejestrowane w Krakowie w dniu 5. maja 1991 roku po miesiącu od złożenia niezbędnych dokumentów. Obecnie siedziba PTPS mieści się w Instytucie Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie. Profesor Kisiel został pierwszym prezesem, a prof. Auleytner jego zastępcą. Oba Profesorom Walne Zebranie (najwyższa władza PTPS) nadało godność Członka Honorowego, prof. J. Auleytnerowi w 2003 r. (laudacje wygłosili wiceprezes Jacek Grochowski i długoletni współpracownik profesora dr Krzysztof Godwod) i prof. A. Kisielowi w 2004 r. [laudacja wygłoszona przez współpracownicę, dr Martę Zimnal-Starnawską została opublikowana w Biuletynie PTPS, tom 4, nr 1-2 (2005)].

W pierwszych latach istnienia PTPS, dzięki prężności działania ośrodków krakowskiego i warszawskiego, stworzony został program działania Towarzystwa.

Głównymi celami PTPS były:

- rozpowszechnianie wiedzy o nowych możliwościach badań, jakie można prowadzić przy użyciu ciągłego widma promieniowania emitowanego przez synchrotron (odczyty, zaproszone referaty, konwersatoria);
- zorganizowanie przemiennie w kolejnych latach dziesięciu *International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS)* i dziewięciu *Krajowych Sympozjów Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego (KSPUS)* w celu prezentacji wyników uzyskanych przy użyciu promieniowania synchrotronowego oraz nowości światowych z tej dziedziny badań;
- rozpowszechnienie informacji o sposobie starania się o przydział czasu synchrotronowego na wykonanie własnych projektów badań;
- powiększanie możliwości współpracy z nowymi ośrodkami synchrotronowymi
- rozpoczęcie starań o zbudowanie źródła promieniowania synchrotronowego w Polsce.

Towarzystwo działa na terenie całego kraju. Środki na działalność pochodzą ze składek członkowskich, a także dotacji pozyskiwanych na określone przedsięwzięcia, m.in. od różnych komitetów i ministerstw, wyższych uczelni i Polskiej Akademii Nauk (Komitety Fizyki i Krystalografii) oraz Komisji Europejskiej.

PTPS systematycznie się rozrasta i aktualnie (koniec kadencji 2008-2011) liczy 156 członków, w tym 1 honorowy, 131 zwyczajnych i 24 sympatyków, wśród nich 11 obcokrajowców.

PTPS prezentuje się na stronie internetowej: <http://www.synchrotron.org.pl>.

Na dwudziestolecie złożyło się sześć kadencji, po dwie na każdego prezesa. Tabela 1 zawiera nazwiska członków Zarządu w minionym dwudziestoleciu, a tabela 2 wymienia najważniejsze osiągnięcia w ciągu tych lat, które poniżej omawiamy w wielkim skrócie.

Tabela 1. Ludzie dwudziestolecia PTPS.

Kadencja	Prezes, wiceprezesa	Sekretarz, skarbnik, wydawca, członek Zarządu. ds. internetu	Członkowie Zarządu	Komisja Rewizyjna: przewodniczący, sekretarz, członkowie
1991-1995	Andrzej Kisiel Julian Auleytner Marek Wołczyr	Krystyna Jabłońska Wojciech Kwiatek	Grzegorz Kowalski Bronisław Orłowski	Henryk Kępa Ewa Sobczak Ewa Czarnecka-Such
1995-1999	Andrzej Kisiel Julian Auleytner Bronisław Orłowski	Marta Zimnal-Starnawska/ Dorota Dębowska Wojciech Kwiatek	Krystyna Jabłońska Izabela Sosnowska	Ewa Sobczak Ewa Czarnecka-Such Helena Grigoriev
1999-2002	Bronisław Orłowski Jacek Grochowski Andrzej Kisiel	Krystyna Jabłońska Wojciech Kwiatek	Andrzej Burian Maria Lefeld-Sosnowska	Ewa Sobczak Bogdan Kowalski Danuta Żymierska
2002-2005	Bronisław Orłowski Jacek Grochowski Krystyna Jabłońska	Danuta Żymierska Wojciech Paszkowicz Jerzy Pełka	Andrzej Burian Janusz Sobczak Jacek Szade	Maria Lefeld-Sosnowska Elżbieta Dynowska Emilia Wolska Wojciech Wierchowski
2005-2008	Krystyna Jabłońska Andrzej Burian Maciej Kozak	Danuta Żymierska Wojciech Kwiatek Wojciech Paszkowicz Bogdan Kowalski	Bronisław Orłowski Adam Pietraszko Paweł Piszora Jacek Szade	Wojciech Wierchowski Elżbieta Dynowska Maria Lefeld-Sosnowska Wojciech Szuszkiewicz
2008-2011	Krystyna Jabłońska Andrzej Burian Maciej Kozak	Danuta Żymierska Wojciech Kwiatek Wojciech Paszkowicz Anna Wolska	Edward A. Görllich Bogdan Kowalski Bronisław Orłowski Paweł Piszora	Wojciech Wierchowski Elżbieta Dynowska Maria Lefeld-Sosnowska Wojciech Szuszkiewicz

1. Organizacja konferencji

W latach 1992-2011 PTPS zorganizowało dziesięć *International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS)*, dziewięć *Krajowych Sympozjów Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego (KSUPS)*, konferencję międzynarodową (w randze konferencji satelitarnej kongresu *European Crystallographic Meeting Kraków ECM – 20 International Symposium on Synchrotron Crystallography (SYNCRY 2001)* w Krynicy-Czarnym Potoku w 2001 r., *Symposium B - Development of methods for characterizing the microstructure of novel materials* w ramach E-MRS 2003 Fall Meeting w 2003 r. w Warszawie oraz Warsztaty na temat technik EXAFS w Warszawie w 2001 r. i 2006 r.

W konferencjach międzynarodowych uczestniczy 80- 120 naukowców z różnych krajów, a w sympozjach krajowych – 60-80 osób. Program ISSRNS obejmuje przeciętnie 25 wykładów plenarnych, 10 referatów zaproszonych oraz 40–75 prezentacji plakatowych, a program KSUPS – 3–7 wykładów, 10 referatów i 25–35 plakatów.

2. Publikacje materiałów konferencyjnych

Materiały z poszczególnych konferencji są ogłaszane drukiem jako prace samodzielne (2 tomy: 1995 i 1999) lub jako tomy „*Acta Physica Polonica*”, Seria A (6 zeszytów: 1992, 1994, 1997, 2002, 2008 oraz 2010), „*Universitatis Iagellonicae Folia Physica*” (2 zeszyty: 1994 oraz 1998), „*Journal of Alloys and Compounds*” (5 zeszytów: 1999, 2001, dwa w

2004 i 2005), „*Radiation Physics and Chemistry*” (2 numery, 2009 i 2011) oraz wyjątkowo w Biuletynie PTPS (Vol. 5, No 3, 2006).

3. Wydawnictwa własne

W ukazującym się od 2002 r. pod redakcją kol. Wojciecha Paszkowicza Biuletynie PTPS pt. „*Synchrotron Radiation in Natural Science. Bulletin of the Polish Physical Society*” ukazują się informacje o działalności i bieżących sprawach PTPS, artykuły dotyczące silnych źródeł światła, metod doświadczalnych oraz programy i streszczenia lub rozszerzone streszczenia wszystkich prezentacji na konferencjach współorganizowanych przez Towarzystwo. Bieżący numer jest numerem jubileuszowym (Vol. 10).

Na tegoroczny jubileusz Towarzystwa przygotowaliśmy skrypt, o którym mowa we wstępie.

4. Inne opracowania

W roku 2006 kol. Wojciech Paszkowicz opracował bazę polskich publikacji synchrotronowych. Na początku baza obejmowała ponad tysiąc publikacji naukowych: 7 habilitacji, 23 doktoraty i 11 prac magisterskich. Baza jest systematycznie aktualizowana, n.p. w roku 2008 liczyła 1642 publikacje: 14 prac magisterskich, 40 prac doktorskich i 14 habilitacji opracowanych na bazie pomiarów synchrotronowych. Aktualnie przekracza 2000 pozycji. Znajduje się na stronie internetowej PTPS.

Tabela 2. Osiągnięcia dwudziestolecia PTPS.

Kadencja	Najważniejsze osiągnięcia	Konferencje	Wydawnictwa
1991-1995	Prace nad statutem i rejestracją PTPS. Rozpowszechnianie wiedzy o możliwościach badań przy użyciu promieniowania synchrotronowego. Inauguracja pierwszych międzynarodowych i krajowych seminariów synchrotronowych. Inicjatywa stworzenia Konsorcjum CENTRALSYNC.	I ISSRNS w Jaszowcu w 1992, 2. KSUPS w Mogilanach w 1993, II ISSRNS w Jaszowcu w 1994, 3. KSUPS w Warszawie w 1995.	Acta Phys. Pol. A 82 (1992) Nos 1 i 2, Univ. Iagel. Folia Physica XXXVI (1994), Acta Phys. Pol. A 86 (1994) No 4 i 5, „Zastosowanie promieniowania synchrotronowego”, Gliwice, 1995.
1995-1999	Prace nad Konsorcjum CENTRALSYNC. Prace nad sprawą przeniesienia SUPER ACO do Krakowa. Przygotowanie danych do zmian w Statucie PTPS.	III ISSRNS w Jaszowcu w 1996, 4. KSUPS w Krakowie w 1997, IV ISSRNS w Jaszowcu w 1998, 5. KSUPS w Warszawie w 1999.	Acta Phys. Pol. A 91 (1996) No 4 i 5, Univ. Iagel. Folia Physica XXXIX (1998) J. Alloys Compd. 286 (1999) No 1-2, „Synchrotron Radiation Studies of Materials”, Warszawa, 1999.
1999-2002	Inauguracja wydawania Biuletynu PTPS. Zapoczątkowanie współpracy PTPS z Polskim Towarzystwem Chemicznym.	V ISSRNS w Jaszowcu w 2000, International Symposium on Synchrotron Crystallography (SYNCRY 2001) w Krynicy-Czarnym Potoku w 2001, VI ISSRNS w Jaszowcu w 2002	J. Alloys Compd. 328 (2001) No 1-2, Acta Phys. Pol. A 101 (2002) No 5, J. Alloys Compd. 362 (2004) No 1-2.
2002-2005	Podpisanie umowy pomiędzy Polską a ESRF. Inauguracja współpracy PTPS z Polskim Towarzystwem Fizycznym. Opracowanie hasła o PTPS do „Słownika polskich towarzystw naukowych”.	Symposium B – <i>Development of methods for characterizing the microstructure of novel materials</i> w ramach E-MSR 2003 Fall Meeting w Warszawie, VII ISSRNS w Zakopanem w 2004, 6. KSUPS w Warszawie w 2005	J. Alloys Compd. 382 (2004) No 1-2, J. Alloys Compd. 401 (2005) No 1-2.
2005-2008	Powstanie Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego. Kontynuacja członkostwa Polski w ESRF. Opracowanie bazy polskich publikacji synchrotronowych. Rejestracja zmian w Statucie PTPS. Opracowanie Regulaminu głosowania elektronicznego PTPS. Uporządkowanie spraw członkowskich.	VIII ISSRNS w Zakopanem w 2006, 7. KSUPS w Poznaniu w 2007, IX ISSRNS w Ameliówce w 2008.	Synchr. Rad. Natural. Sci. 5 (2006) No3, Acta Phys. Pol. A 114 (2008) No 2, Radiat. Phys. Chem. 78 Suppl.10 (2009).
2008-2011	Kontynuacja członkostwa Polski w ESRF. 2010 – podpisanie umowy pomiędzy MNiSW a UJ w sprawie budowy polskiego synchrotronu. 2010 – ratyfikowanie przez Polski Parlament umowy o E-XFEL.	8. KSUPS w Podlesicach w 2009, X ISSRNS w Szklarskiej Porębie w 2010, 9. KSUPS w Warszawie w 2011	Acta Phys. Pol. A 117 (2010) No 2, Radiat. Phys. Chem. 80 No 10 (2011).

W roku 2003 kol. Danuta Żymierska opracowała hasło o PTPS do „Słownika polskich towarzystw naukowych” przygotowywanego przez Bibliotekę Polskiej Akademii Nauk na zamówienie Rady Towarzystw Naukowych.

5. Udział w projekcie *Narodowe Centrum Promieniowania Synchrotronowego*

Członkowie PTPS brali również aktywny udział we wspieraniu projektu budowy polskiego synchrotronu.

Projektem *Narodowe Centrum Promieniowania Synchrotronowego* kierował członek PTPS, prof. Krzysztof Królas z Uniwersytetu Jagiellońskiego, przy bardzo aktywnej współpracy dwóch innych członków PTPS, profesorów UJ Edwarda A. Görlicha i Krzysztofa Tomali. Starania o budowę polskiego synchrotronu wspierało konsorcjum *Polski Synchrotron* składające się z 21 uczelni wyższych i 12 instytutów naukowych. W roku 2008 PTPS podpisało dwustronną umowę z Narodowym Centrum Promieniowania

Synchrotronowego. Znaczne ograniczenie finansowania synchrotronu na poziomie 40 mln euro spowodowało zasadnicze zmiany projektu z dużego synchrotronu o energii 3 GeV do małego o maksymalnej energii 1,5 GeV. Umowa na realizację projektu została podpisana w 2010 roku. Dyrektorem Centrum, nazwanego SOLARIS, został prof. Marek Stankiewicz, członek PTPS. Projekt budowlany ma być gotowy we wrześniu 2011 roku, a pozwolenie na budowę ma być wydane do końca roku.

6. Udział w ESRF

Dzięki usilnym staraniom kolejnych prezesów i wielu członków PTPS od roku 2004 przez siedem lat Polska była członkiem stowarzyszonym w Europejskim Źródle Promieniowania Synchrotronowego (ESRF) w Grenoble, wnosząc udział finansowy zarówno do bieżących kosztów eksploatacji urządzenia, jak i spłacając odpowiednią część kosztów jego budowy. Uczni polscy w stopniu odpowiadającym udziałowi finansowemu wykorzystywali z powodzeniem linie pomiarowe tej europejskiej struktury badawczej.

Polskim przedstawicielem w Zarządzie spółki ESRF była prof. Krystyna Jabłońska, prezes PTPS. Polskim przedstawicielem w Komitecie ds. ekonomicznych i finansowych był prof. Bogdan Kowalski, członek Zarządu PTPS. Droga wyboru prof. Mariusz Jaskólski, długoletni członek PTPS, został przedstawicielem krajów stowarzyszonych w Naukowym Komitecie Doradczym (SAC) w ESRF. Prof. Maciej Kozak, wiceprezes PTPS, jest członkiem Komitetu oceniającego projekty. Przedstawiciele Polski uczestniczyli w posiedzeniach odpowiednich ciał w ESRF.

Finansowanie projektu, prowadzonego w IF PAN przez prof. Krystynę Jabłońską, poprzez który wpłacano polski wkład do ESRF zakończyło się w czerwcu 2011 roku. W nowej ustawie o finansowaniu nauki nie istnieje ścieżka prawna, która umożliwiałaby finansowanie polskiego wkładu do budżetu ESRF. Nasze środowisko naukowe jest zainteresowane prowadzeniem badań z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego w ESRF, dlatego Zarząd PTPS usilnie popiera starania Instytutu Fizyki PAN prowadzone w imieniu Konsorcjum instytutów naukowych oraz całej społeczności naukowców o umożliwienie kontynuacji udziału Polski w ESRF. Uchwała Zarządu w tej sprawie z dnia 8. lipca 2011 roku została przesłana do sekretariatu MNiSW.

7. Udział w projektach dotyczących laserów na swobodnych elektronach

Towarzystwo uczestniczy w dwóch projektach laserów na swobodnych elektronach: w europejskim E-XFEL w Hamburgu i polskim POLFEL w Świerku.

Prezes PTPS brała aktywny udział (jako członek) w pracach zespołu negocjującego udział Polski w projekcie E-XFEL. Umowa międzynarodowa dotycząca udziału Polski w E-XFEL została ratyfikowana przez polski Parlament w roku 2010. Została więc otwarta droga do prawomocnego uczestnictwa Polski w tym projekcie. MNiSW oficjalnie

przekazuje polski wkład do spółki. Kol. Jabłońska została wybrana na okres 3 lat członkiem Scientific Advisory Committee przy E-XFEL.

8. Współpraca z innymi towarzystwami

Towarzystwo współpracowało z Europejskim Towarzystwem Promieniowania Synchrotronowego (European Synchrotron Radiation Society - ESRS) dopóki tamto wykazywało aktywność. W roku 2010 powstała Europejska Organizacja Użytkowników Synchrotronów (EUSO). Organizacja ta skupia wszystkie narodowe europejskie organizacje i przedstawicieli użytkowników ze wszystkich europejskich synchrotronów. W skład zarządu weszła kol. Jabłońska. Celem tej organizacji jest reprezentacja interesów użytkowników synchrotronów w narodowych i europejskich agencjach finansujących oraz kontakt z dyrektorami europejskich synchrotronów, co w obecnej sytuacji jest niezwykle ważne.

W 1999 roku została podpisana umowa o współpracy z Polskim Towarzystwem Chemicznym, a w roku 2004 *Porozumienie o Współpracy między Polskim Towarzystwem Fizycznym i Polskim Towarzystwem Promieniowania Synchrotronowego*. Oba Towarzystwa wyraziły wolę współpracy w zamiarze lepszego wykorzystania swoich możliwości w realizacji celów statutowych.

9. Funkcjonowanie Towarzystwa

Dokumentem konstytuującym działalność PTPS jest jego Statut. Pierwszy Statut opracowany w roku 1991 był podstawą do zarejestrowania Towarzystwa. W roku 1999 Walne Zebranie wprowadziło zmiany w Statucie m.in. bezpośrednie wybory prezesa, natomiast w roku 2006 dostosowano Statut do aktualnych przepisów prawnych. Najważniejszą z poprawek wtedy wprowadzonych było dodanie art. 27 o brzmieniu: „*Walne Zebranie może podejmować uchwały poprzez głosowanie drogą elektroniczną, przy czym głosowanie takie jest ważne przy uczestnictwie co najmniej połowy uprawnionych do głosowania, w jednym terminie, w określonym ograniczonym czasie, zaś głosy przyjmowane są i obliczane zgodnie z regulaminem głosowania drogą elektroniczną*”. Zarząd opracował *Regulamin głosowania elektronicznego PTPS*. W dniu 25 października 2006 roku po raz pierwszy przeprowadziliśmy głosowanie drogą elektroniczną.

Dziś z przyjemnością obchodzimy nasze dwudziestolecie z poczuciem pomyślnej realizacji głównych punktów zaplanowanego przez nas programu. Dwadzieścia lat to jest akurat okres wzrostu jednego pokolenia. Koledzy, którzy uczestniczyli w pracach związanych z działaniem PTPS, dziś mogą obejrzeć się za siebie i zobaczyć jak dużo się nauczyliśmy, jakie zrobiliśmy badania, a jednocześnie jak znacznie zmieniły się warunki pracy przy synchrotronie.

W okresie tych dwudziestu lat udało się doprowadzić do budowy polskiego synchrotronu Solaris. Rejestrując PTPS nie śmieliśmy o tym nawet marzyć. Później próby sprowadzenia do Polski demontowanych synchrotronów nie powiodły się. Dopiero fundusze europejskie otworzyły realną szansę wybudowania tego urządzenia. Do prac z promieniowaniem

synchrotronowym posiadamy wielopokoleniową kadrę naukową zarówno w kraju, jak i pracującą w słynnych światowych ośrodkach synchrotronowych. Posiadamy własną bogatą technologię nowych materiałów, nanostruktur, preparatów biologicznych i farmaceutycznych. Właśnie teraz musimy się włączyć do badań tych materiałów z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego tworząc własną specyfikę, własną szkołę. Projekty naszych badań ściśle związane z naszymi nowymi pomysłami (materiałów i badań) przyjmowane obecnie przez inne ośrodki synchrotronowe będą mogły być w dużej części wykonywane na naszym synchrotronie. Staniemy się ośrodkiem odwiedzanym przez naukowców z sąsiednich krajów.

Będziemy wspólnie cieszyć się z kamienia węgielnego, jaki będzie położony pod budowę naszego narodowego

synchrotronu SOLARIS. Mamy nadzieję, że za kilka lat dzięki promieniowaniu emitowanemu z SOLARIS polscy naukowcy będą mogli wykonywać ciekawe i pożyteczne badania. Pamiętajmy jednak, że mamy do wykonania piękną, lecz trudną pracę. Postarajmy się dać efektywny wkład w to przedsięwzięcie uczestnicząc, każdy na swój sposób, w tej budowie. To, czy szansa zostanie wykorzystana, zależy w dużym stopniu od naszego zaangażowania.

Zachęcamy wszystkich Członków Towarzystwa do aktywnego udziału w poprawianiu warunków pracy przy synchrotronach, a w szczególności do pomocy przy budowie Polskiego Źródła Promieniowania Synchrotronowego SOLARIS.

Z życia Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego



Fot. 1. Uczestnicy X International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS-2010) w Szklarskiej Porębie.
(fot. P. Piszora)

X. International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS-2010) współorganizowane przez Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego i Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu odbyły się w pięknej scenerii Karkonoszy w Szklarskiej Porębie w dniach od 6 do 11 czerwca 2010 roku. W spotkaniu wzięło udział 105 uczestników z 15 krajów, w tym 72 z Polski; wśród uczestników było 24 studentów (Fot. 1). Wygłoszono 27 wykładów zaproszonych, 16 referatów i zaprezentowano 57 plakatów.

Dzięki interesującym wykładom i prezentacjom uczestnicy konferencji mogli poznać najnowsze trendy badawcze, nowe techniki pomiarowe oraz nowe możliwości źródeł promieniowania synchrotronowego.

Konferencja odbywała się dwa miesiące po podpisaniu umowy na budowę polskiego synchrotronu SOLARIS (oficjalnie Narodowego Centrum Promieniowania Elektromagnetycznego), toteż sprawy związane z budową synchrotronu zdominowały konferencję, a szczególne zainteresowanie wzbudził referat nowo mianowanego dyrektora Centrum, prof. Marka Stankiewicza z Uniwersytetu Jagiellońskiego, członka PTPS, na temat stanu organizacji i budowy synchrotronu. W ożywionej dyskusji po tym referacie aktywnie uczestniczyli goście zagraniczni szczerze zainteresowani powodzeniem polskiego przedsięwzięcia. Poniżej podaję aktualne informacje o polskim synchrotronie (stan z lipca 2011 roku).

Realizacja projektu zakłada konieczność otrzymania pozwolenia na budowę przed końcem roku 2011. Projekt

budowlany ma być gotowy we wrześniu b.r. Czynione są starania, aby w tym projekcie powierzchnia hali eksperymentalnej synchrotronu była jak największa oraz aby projekt przewidywał możliwość jej rozbudowy. Rozważana jest również alternatywna możliwość wybudowania w pierwszym etapie większej samej płyty pod halę eksperymentalną.

Centrum Promieniowania Synchrotronowego nadal ściśle współpracuje z MAX-labem. W grudniu 2010 r. podpisano oficjalne porozumienie, w którym MAX-lab zobowiązał się do nieodpłatnego przekazania projektu synchrotronu. Porozumienie to jest podstawą do zawierania wspólnych umów na elementy do budowy urządzenia. Ponadto wypracowano procedurę pozwalającą na korzystanie z przetargów na sprzęt przeprowadzanych przez MAX-lab. Prowadzona jest też aktywna współpraca z synchrotronami: ALBA (Hiszpania), SLS (Szwajcaria) i ELETTRA (Włochy), gdzie przebywają naukowcy z Polski uczestniczący w pracach konstrukcyjnych systemów, które będą wykorzystywane w SOLARIS. Dzięki zabiegom prof. Stankiewicza zatrudniono jako kierownika technicznego projektu prof. Carlo Bocchetti, posiadającego wieloletnie doświadczenie w zakresie budowy źródeł synchrotronowych.

Został rozstrzygnięty konkurs na logo synchrotronu. Bieżące informacje o SOLARIS można znaleźć na stronie www.synchrotron.pl

Teraz nadchodzi czas starań o finansowanie następnych linii pomiarowych. Przygotowano wnioski o sfinansowanie 2 linii z funduszu prywatyzacyjnego.

Materiały konferencyjne, zawierające wybrane wykłady, referaty i prezentacje plakatowe (w sumie 28 artykułów),

ukazą się w październiku roku 2011 w zeszycie 10 tomu 80 międzynarodowego czasopisma „*Radiation Physics and Chemistry*”.

Uczestnicy Szkoły mieli też okazję podziwiać piękno Karkonoszy podczas dwóch trzygodzinnych wycieczek. Podczas objazdu poznali okolicę oraz najważniejsze zabytki Dolnego Śląska (zamki, pałace, kościoły, młyny, domy tkaczy i osadników) w... miniaturze (Fot. 2), a w czasie wycieczki pieszej sięgali daleko wzrokiem (Fot. 3 i Fot.4) i próbowali ruszyć z posad zamiast bryły światła gład o nazwie Chybotek (Fot. 5).

W trakcie Międzynarodowego Sympozjum, w dniu 10. czerwca 2010 roku, odbyło się Walne Zebranie Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego, w którym wzięło udział 38 członków Towarzystwa. Przyjęto siedmioro nowych członków zwyczajnych i trzech sympatyków: z Australii, Hiszpanii i Słowacji. W ten sposób stan PTPS wzrósł do 156 członków, w tym 1 honorowy, 131 zwyczajnych, 24 sympatyków (wśród nich 11 obcokrajowców).



Fot. 2. W Parku Miniatur w Kowarach uczestnicy podziwiali sławne zamki śląskie, m.in. Książ. (fot. E. Guziewicz)



Fot. 3. Uczestnicy ISSRNS-2010 na platformie widokowej na panoramę Karkonoszy. (fot. E. Guziewicz)



Fot. 4. Zauroczenie pięknem falującego krajobrazu. (fot. K. Szpotkowski)



Fot. 5. Chybotek nie poddał się uczestnikom Szkoły. (fot. E. Guziewicz)

Walne Zebranie w głosowaniu jawnym zaakceptowało sprawozdania z działalności Zarządu: merytoryczne, które przedstawiła prezes Krystyna Jabłońska, finansowe przedstawione przez skarbnika Wojciecha Kwiatka i Komisji

Rewizyjnej przedstawione przez jej przewodniczącego Wojciecha Wierzchowskiego.

Następnie podjęto uchwałę, że 9. Krajowe Sympozjum Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego jesienią 2011 roku zorganizują koledzy z Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie pod przewodnictwem kol. Zbigniewa Kaszkura, natomiast organizację następnej szkoły międzynarodowej w roku 2012 powierzono kol. Wojciechowi Kwiatkowi z Instytutu Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie.

Prezes przypomniała przedstawioną na poprzednim Walnym Zebraniu propozycję podjęcia starań o przyznanie Polsce organizacji w roku 2015 dużej (na ok. 600 osób) 16 Międzynarodowej Konferencji Absorpcji Rentgenowskiej XAFS16. Uprzednio ustalono lokalizację konferencji w Krakowie oraz wskazano Wojciecha Kwiatka na przewodniczącego Komitetu Organizacyjnego. Kol. Kwiatek stwierdził, że termin i lokalizacja jest bardzo dobra, ponieważ 2015 roku będziemy już mogli się pochwalić działającym polskim synchrotronem w Krakowie. Kraków ma dobrą i dużą bazę hotelową, jest atrakcyjny pod względem turystycznym, co jest istotne przy organizowaniu dużych konferencji międzynarodowych. Po krótkiej dyskusji zebrani upoważnili Zarząd do opracowania i złożenia oferty. Polskie zgłoszenie przygotowane znakomicie przez kol. Wojciecha Kwiatka zostało bardzo dobrze ocenione, ale niestety Zarząd IXAS wybrał zgłoszenie niemieckie. Zarząd upoważnił kol. Kwiatka do zgłoszenia kandydatury Krakowa do organizacji konferencji XAFS17 w roku 2018. W przypadku przyznania Polsce organizacji tej konferencji będzie to promocja naszego kraju, środowiska naukowego, polskiego synchrotronu oraz Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego.

W 6 i 7 Programie Ramowym Unii Europejskiej projekty przygotowane przez konsorcja synchrotronów i laserów na swobodnych elektronach uzyskiwały finansowanie. W ramach tych projektów europejscy naukowcy otrzymywali pomoc w pokryciu kosztów przejazdu i pobytu w czasie realizacji projektów synchrotronowych, a źródła narodowe refundację kosztów wiązki synchrotronowej używanej do realizacji badań przez naukowców z innych krajów. Ostatni finansowany przez UE taki projekt ELISA zakończył się w sierpniu 2011 roku. Wniosek o kolejny projekt CECILIA nie uzyskał finansowania. Od września 2011 roku pobyty i podróże zagranicznych użytkowników nie będą finansowane przez synchrotrony. Większość krajów UE nie posiada odpowiednich instrumentów finansowych, które pozwoliłyby na finansowanie projektów synchrotronowych. Zaniepokojeni tymi zapowiedziami użytkownicy PS powołali Europejską Organizację Użytkowników Synchrotronów (ESUO – European Synchrotron Users Organization), która stara się działać na rzecz kontynuacji programu Open Access w 8 PR. W skład Zarządu tej organizacji weszła prezes Jabłońska, która reprezentuje w niej Polskę. Więcej informacji można znaleźć na stronie:

<http://www.elettra.eu/ELISA/index.php?n=Main.EuropeanSynchrotronUserOrganization>

Bardzo istotne jest, aby wszyscy użytkownicy synchrotronów odpowiadali aktywnie na apele wsparcia dla akcji proponowanych przez ESUO.

Od Walnego Zebrania w Szklarskiej Porębie Zarząd odbył 5 zebrań w formie konferencji internetowych: 4. października 2010 roku, 13. stycznia 2011 roku, 17 lutego 2011 roku, 8. lipca 2011 roku oraz 13. września 2011 roku. Na zebraniu w dniu 8. lipca 2011 roku Zarząd podjął następujące uchwały dotyczące przyszłych wyborów:

Uchwała 1

Zarząd postanawia przeprowadzić wybory nowych władz PTPS drogą elektroniczną.

Uchwała 2

Zarząd przyjmuje następujący tryb i terminarz przeprowadzenia wyborów o którym zostaną powiadomieni członkowie PTPS:

- 1. Zgłaszanie kandydatów wraz z uzyskaną zgodą na kandydowanie* do 28 września 2011 roku na adres ptps@synchrotron.org.pl*
- 2. Kandydaci do Zarządu nie mogą jednocześnie kandydować do Komisji Rewizyjnej.*
- 3. Lista kandydatów będzie publikowana na bieżąco na stronie internetowej PTPS.*
- 4. Wybory Prezesa odbędą się 3 i 4 października 2011 roku, a wybory członków Zarządu i Komisji Rewizyjnej odbędą się 6. i 7. października 2011 roku.*
- 5. Wyniki wyborów zostaną ogłoszone 11 października 2011 roku na stronie internetowej. Członkowie PTPS zostaną o nich dodatkowo powiadomieni e-mailem.*

*Zgoda na kandydowanie powinna zawierać np. sformułowanie: „Niniejszym wyrażam zgodę na kandydowanie na funkcję, data, podpis”.

Więcej szczegółów o Towarzystwie, w tym zawartość poszczególnych numerów *Biuletynu PTPS*, mogą Państwo znaleźć na stronie internetowej PTPS

<http://www.synchrotron.org.pl>,

do odwiedzania której serdecznie zapraszam.

Danuta Żymierska

Sekretarz Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego

Działalność Polskiego Towarzystwa Wzrostu Kryształów

Towarzystwa naukowe przyczyniają się do rozwoju nauki poprzez upowszechnianie osiągnięć, rozwijanie współpracy naukowej, kształcenie młodej kadry i popularyzację danej dziedziny nauki. Polskie Towarzystwo Wzrostu Kryształów (PTWK) jest jednym z najprężniej działających Towarzystw w Polsce. Dzięki uprzejmości dyrektora Instytutu Technologii Materiałów Elektronicznych (ITME) obecnie siedziba Towarzystwa znajduje się w Warszawie, ul. Wólczyńska 133.

Działalnością PTKW kieruje Zarząd, wybierany podczas Walnego Zgromadzenia członków PTKW na trzyletnią kadencję. Jest regułą, że Walne Zebrania odbywają się podczas Polskich Konferencji Wzrostu Kryształów odbywających się co 3 lata w wiodących polskich ośrodkach naukowych. W skład Zarządu wchodzi Prezes, Prezes-Elekt wybierany na kadencję z trzyletnim wyprzedzeniem, Ex-Prezes, Sekretarz, Sekretarz Techniczny oraz przewodniczący Sekcji. Obecnie PTKW składa się z czterech Sekcji: Kryształów Objętościowych, Mikrostruktur Krystalicznych, Nanokryształów oraz Biokryształizacji. Działalność Zarządu podlega kontroli Komisji Rewizyjnej, również wybieranej na Walnym Zebraniu członków PTKW. Działalność Towarzystwa jest prezentowana na stronie <http://www.ptwk.org.pl>. Głównymi statutowymi celami PTKW są: wspieranie współpracy między członkami PTKW, a przez to podnoszenie ogólnego poziomu wiedzy z dziedziny krystalizacji, upowszechnianie wyników polskich naukowców zajmujących się hodowlą kryształów wśród społeczeństwa oraz pobudzanie szerokiego zainteresowania tą dziedziną nauki, aktywny udział w międzynarodowym ruchu związanym ze wzrostem kryształów, a szczególnie utrzymanie ścisłych kontaktów z Międzynarodową Organizacją Wzrostu Kryształów (International Organisation for Crystal Growth, w skrócie IOCG <http://www.iocg.org>).

Polskie Towarzystwo Wzrostu Kryształów (w skrócie PTKW; przyjęta angielska nazwa: Polish Society for Crystal Growth, PSCG) zostało powołane do życia w czasie trwania Pierwszej Polskiej Konferencji Wzrostu Kryształów (First Polish Conference on Crystal Growth; PCCG-1), która odbyła się 23 maja 1991 roku w Częstochowie z inicjatywy Prof. A. Pajączkowskiej i Prof. K. Sangwala. Patronem Towarzystwa jest profesor Jan Czochralski, wynalazca i wybitny naukowiec, prekursor rozwoju światowej elektroniki. Organizowane przez PTKW co trzy lata międzynarodowe konferencje na temat wzrostu kryształów zazwyczaj otwiera wykład wprowadzający nazwany imieniem prof. Jana Czochralskiego. Te wykłady są powierzane uznanym naukowcom o światowej renomie z dziedziny wzrostu kryształów. W ten sposób PTKW propaguje osiągnięcia

naukowe swojego patrona. Prof. J. Czochralski w roku 1916 zaproponował metodę wyciągania kryształów metali z roztopu w kierunku przeciwnym do sił grawitacji. Metoda, nazywaną później jego imieniem, została wynaleziona podczas badań szybkości krystalizacji metali. W latach 50 – tych XX wieku metoda Czochralskiego została wykorzystana przez Gordona Teala i Johna Little'a do hodowli kryształu germanu, wykorzystanego następnie w pierwszych tranzystorach. Potem german zastąpiono krzemem i do dzisiaj metodą Czochralskiego hoduje się na skalę przemysłową olbrzymich rozmiarów kryształy krzemu czy arsenku galu wykorzystywane do produkcji diod, tranzystorów, układów scalonych czy ogniw słonecznych. Także duża ilość m. in. kryształów tlenkowych, stosowanych w nowoczesnych technologiach, jest otrzymywana przy użyciu tej metody. Istotnym warunkiem jej zastosowania jest topienie kongruentne (bez rozłożenia) krystalizowanych materiałów. Ze względu na doniosłość wynalazku i olbrzymie zastosowania praktyczne metody, Czochralskiego nazywa się „Prajcem elektroniki” a nazwisko polskiego uczonego jest najczęściej cytowane w literaturze naukowej.

W ostatnich latach metoda Czochralskiego została szeroko rozwinięta tak pod względem technicznym, aparaturowym jak i rozmiarów otrzymywanych kryształów. Krystalizacja tą metodą jest w Polsce stosowana między innymi w Instytucie Technologii Materiałów Elektronicznych (ITME), w Instytucie Fizyki PAN (IF PAN) oraz w Instytucie Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Warszawskiego (IFD UW) w Warszawie. Również w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Śląskiego (IF UŚ) stosuje się metodę Czochralskiego do hodowli monokryształów związków międzymetalicznych ważnych dla przyszłych chłodziarek magnetycznych. Obecnie, zarówno metoda Czochralskiego jak i inne metody wzrostu kryształów objętościowych są intensywnie rozwijane przez naukowców z wiodących instytutów naukowych. W PTKW tą tematyką zajmuje się Sekcja Kryształów Objętościowych. Do najbardziej znaczących polskich osiągnięć w tej dziedzinie jest rozwój metod wzrostu kryształów objętościowych azotku galu, dzięki którym Ammono Sp. z o.o. oraz Instytut Wysokich Ciśnień PAN (IWC PAN) otrzymują najlepsze w świecie kryształy GaN. Obecnie trwają prace nad ilościowym rozwojem tej metody. Innym znaczącym osiągnięciem jest krystalizacja tlenków metodą Czochralskiego rozwijana w ITME oraz IF PAN. Rezultaty te są porównywalne z wynikami najlepszych laboratoriów na świecie. Znaczącą dziedziną jest też rozwój krystalizacji objętościowych kryształów półprzewodników II-VI. W laboratoriach IF PAN osiągnięto światowy poziom w tej dziedzinie, szczególnie w krystalizacji ZnSe, CdSe i

innych. Rozwijany w ITME program wzrostu kryształów krzemu ma charakter niszowy. Jednak po komercjalizacji w firmie Cemat-Silicon, produkcja krzemu pozostaje znacząco w tyle za wiodącymi wynikami Japonii i Niemiec.

Działalność Sekcji Mikrostruktur, rozwijana w okresie wielu lat, również doprowadziła do wyników na poziomie światowym. W Polsce istnieje kilka znaczących ośrodków naukowych, w których rozwijane są techniki wzrostu epitaksjalnego i ich zastosowanie do otrzymywania struktur i przyrządów. Do wiodących należą między innymi laboratoria IWC PAN, IF PAN, ITME, Instytutu Technologii Elektronowej (ITE), IFD UW oraz Wydziału Elektroniki Mikrosystemów i Fotoniki Politechniki Wrocławskiej (WEMiF PWr). Do szczególnie znaczących osiągnięć należy rozwój technologii struktur azotkowych w IWC PAN, który doprowadził do konstrukcji diod LED oraz laserów fioletowych i niebieskich. Obecnie po komercjalizacji w firmie TopGaN, lasery azotkowe są oferowane komercyjnie (<http://topgan.eu>). Znaczące wyniki w epitaksji azotków metali grupy III zostały również otrzymane w WEMiF PWr, IFD UW, IF PAN oraz ITME. Badania te są prowadzone w celu uzyskania tranzystorów polowych (FET), sensorów molekularnych i detektorów światła. Innym kierunkiem badań intensywnie rozwijanych w Polsce jest epitaksja związków półprzewodnikowych II-VI. Badania takie, prowadzone głównie w IF PAN, doprowadziły do uzyskania kropek i drutów kwantowych, o potencjalnie znaczących zastosowaniach w przyszłości. Równie interesujące wyniki osiągnięto w epitaksji półprzewodników III-V (arsenki i antymonki) w ITE.

Dwie nowe sekcje: Nanokryształów oraz Biokryształizacji zostały powołane podczas Walnego Zebrania członków PTWK na konferencji IX International Conference of Polish Society for Crystal Growth - ICPSCG-9 w Gdańsku w 2010 roku. Sekcje te zajmują się rozwojem nowoczesnych dziedzin nauki związanych z burzliwym rozwojem nanotechnologii oraz kryształizacji materiałów w środowisku materii żywej.

Należy też podkreślić duże zaangażowanie wielu grup badawczych zajmujących się charakteryzacją materiałów krystalicznych, opisem teoretycznym procesów wzrostu kryształów, a także wytwarzaniem i analizą właściwości biomateriałów. Grupy takie znaleźć można w każdym z dużych ośrodków badawczych i akademickich.

PTWK podejmuje wiele inicjatyw mających na celu szerokie propagowanie polskich osiągnięć w dziedzinie wzrostu kryształów na arenie międzynarodowej. Za duże osiągnięcie należy uznać przyznanie PTWK prawa organizacji wraz z Niemieckim Towarzystwem Wzrostu Kryształów (DGKK) światowego kongresu „17th International Conference on Crystal Growth and Epitaxy” (ICCGE-17 <http://science24.com/event/iccg17/>) który odbędzie się w dniach 11-16 sierpnia 2013 w Warszawie. Komitetowi organizacyjnemu ICCGE17 przewodniczy Prof. S. Krukowski z IWC PAN, zaś Komitetowi Programowemu Prof. Z.R. Żytkiewicz z IF PAN. Równocześnie z

Konferencją odbędzie się „15th International Summer School on Crystal Growth” organizowana w dniach 6-10 sierpnia 2013 w Gdańsku przez Prof. W. Sadowskiego z Politechniki Gdańskiej i Prof. E. Talik z Politechniki Śląskiej (<http://science24.com/event/isscg15/>).

Do ostatnio zorganizowanych przedsięwzięć należy konferencja naukowa – German - Polish Conference on Crystal Growth (GPCCG 2011, www.dgkk.de/GPCCG-2011) in conjunction with a Symposium on Photovoltaic Materials of DGKK and PTWK „Crystalline Materials for Advanced Applications”, która odbyła się 14-18 marca 2011 we Frankfurcie nad Odrą i Ślubicach. Konferencja ta była wspólnym przedsięwzięciem Niemieckiego Towarzystwa Wzrostu Kryształów (DGKK) i PTWK. Była to kontynuacja owocnej, wieloletniej współpracy polskiego i niemieckiego środowiska naukowego wzrostu kryształów. Innym wyrazem owocnej współpracy były wspólne polsko-niemiecko-japońskie konferencje wzrostu kryształów organizowane w Berlinie i Zakopanem. Zakończyły się one sukcesem i doprowadziły do intensyfikacji wymiany naukowej pomiędzy naszymi krajami.

Niezmiernie interesującym i perspektywicznym jest nawiązanie nowych i rozwój istniejących współprac PTWK i DGKK w dziedzinie zastosowań półprzewodników i innych materiałów dla fotowoltaiki, w tym konstrukcji ogniw słonecznych, inwerterów prądu stałego na zmienny oraz magazynowania energii. Niemcy są liderem światowym w tej dziedzinie. Opracowali nowoczesne technologie ogniw krzemowych i cienko-warstwowych, a wiele z tych opracowań wdrożone zostało do produkcji. W związku z rozwojem w Polsce fizyki i technologii półprzewodników azotkowych, technologii krzemu, badań struktur fotowoltaicznych typu CIGS oraz rozpoczętymi badaniami w zakresie jonowych baterii litowych spodziewamy się nawiązania nowych współprac z wiodącymi ośrodkami naukowymi w Niemczech. Pewne współprace w szeregu tematach zostały już podjęte, m.in. przez Wydział Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, IWC PAN i Politechnikę Wrocławską.

Najnowszym przedsięwzięciem PTWK było zorganizowanie przez członków Towarzystwa i Uniwersytetu Śląskiego Mikrosymposium MS28 na konferencji The XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography w Madrycie 22-30 sierpnia 2011 pt. “Wide Band Semiconductor and other Crystals Used in Optoelectronics” (zdjęcie poniżej).

Ważną formą aktywności PTWK jest działalność edukacyjna. Pod patronatem PTWK odbywają się Seminaria IF Uniwersytetu Śląskiego np. "Nagroda Nobla z fizyki 2010". Ostatnio wykład wygłosił dr inż. Włodzimierz Strupiński z Instytutu Technologii Materiałów Elektronicznych („Grafen – nowe wyzwanie dla Nanotechnologii”). Od kilku lat w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Uniwersytetu Warszawskiego prowadzone są całoroczne cykle wykładów poświęcone fizyce i technologii wzrostu kryształów (<http://www.icm.edu.pl/web/guest/edukacja>).



Madryt 24.08.2011. K. Roleder, W. Paszkowicz, M. Leszczyński (PTWK), E. Talik (PTWK), H. Dąbkowska (IOCG).

Również pod patronatem PTWK odbyła się wycieczka dla nauczycieli ze Śląska współpracujących z Pracownią Dydaktyki Fizyki IF UŚ do ITME w Warszawie w połączeniu ze zwiedzaniem pracowni wzrostu kryształów ITME i wykładami wybitnych specjalistów. PTWK zajmuje się też popularyzacją zagadnień wzrostu kryształów i krystalografii poprzez np. organizację „Osobliwości Świata Fizyki” i Festiwalu Nauki na Uniwersytecie Śląskim realizowanymi przez członków PTWK i między innymi dzięki wypożyczaniu monokryształów i produktów ITME. Ostatnio PTWK

uczestniczy w tworzeniu europejskiego ruchu wzrostu kryształów (“Meeting on Consolidation and Coordination of the European Crystal Growth Activities” Berlin 20-21 October 2010, E. Talik - President of Polish Society for Crystal Growth).

Prezes PTWK Prof. Ewa Talik (Uniwersytet Śląski)

Prof. Stanisław Krukowski IWC PAN

Prof. Zbigniew R. Żytkiewicz IF PAN

Działalność Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego

Polskie Towarzystwo Krystalograficzne zostało zarejestrowane przez 26-ciu Członków Założycieli w 2006 roku w Krakowie. Pierwsze Nadzwyczajne Walne Zgromadzenie Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego odbyło się w dniu 29 czerwca 2006 roku we Wrocławiu (Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, ul. Okólna 2). Zwyczajowo, kolejne Walne Zgromadzenia odbywają się co rok w trakcie organizowanego we Wrocławiu Konwersatorium Krystalograficznego. Obecnie Towarzystwo liczy ok. 125 członków z różnych krajowych ośrodków naukowych.

Dzięki długo oczekivanemu powołaniu Towarzystwa, za jego pośrednictwem Polska mogła stać się członkiem Międzynarodowej Unii Krystalograficznej (International Union of Crystallography). Celem Towarzystwa jest wspieranie rozwoju badań naukowych z wykorzystaniem metod krystalografii oraz popularyzacja krystalografii. Polskim Towarzystwem Krystalograficznym kieruje Zarząd. Członkowie Zarządu Towarzystwa wybierani są przez Walne Zgromadzenie w wyborach bezpośrednich na trzyletnią kadencję. W skład Zarządu może wejść od 3 do 11 osób. Walne Zgromadzenie może wybrać Prezesa Zarządu (wybór Prezesa nie jest obligatoryjny). Siedzibą Towarzystwa jest Kraków (Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego). Pierwszym Prezesem został prof. Stanisław Hodorowicz (UJ, Kraków) a obecnym został prof. Janusz Lipkowski (IChF, Warszawa).

Co roku w trakcie organizowanego we Wrocławiu Konwersatorium Krystalograficznego Towarzystwo organizuje sesję naukową i/lub warsztaty poświęcone wybranej tematyce.

Polskie Towarzystwo Krystalograficzne podejmuje wysiłki reprezentowania głosu polskich krystalografów w kwestii kształcenia krystalografii. Pod auspicjami Towarzystwa opracowano wstępną wersję "Treści związanych z krystalografią, występujących w obecnie obowiązujących standardach kształcenia". Jest ona dostępna na witrynie Towarzystwa [1].

W bieżącym roku Towarzystwo, oprócz sesji naukowej i warsztatów na Konwersatorium Krystalograficznym, zorganizowało dwie konferencje: „International Seminar on Inclusion Compounds” [2] oraz „Polish School of Crystallography – Chemical Crystallography of the XXIst Century” [3]. Obie zorganizowano w Gierłozie k/Kętrzyna na Mazurach. Na konferencje te zaproszono czołowych światowych krystalografów specjalizujących się w krystalografii chemicznej. Obie wpisały się w obchody Międzynarodowego Roku Chemii.

Referencje

- [1] <http://www.ichf.edu.pl/ptk>
- [2] <http://www.isic13.eu>
- [3] <http://www.crystschool.eu>

Zbigniew Kaszukur
Sekretarz PTK

11th International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS'2012)

Kraków, 20th-25th May 2012

ISSRNS is a series of meetings, organised every two years, devoted to recent advances and new techniques employing synchrotron radiation in physics, chemistry, materials science, biology and medicine.

The 11th International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS'2012) will be organized by Polish Synchrotron Radiation Society (PSRS) in cooperation with the Henryk Niewodniczański Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences, Kraków, Poland from 20th to 25th of May 2012 in Kraków-Tyniec (Poland).

ISSRNS is a traditional forum for discussing fundamental issues of application of the synchrotron radiation and related methods in natural sciences. The aim of this interdisciplinary meeting is to bring together scientists working with synchrotron radiation. The Symposium will focus on novel applications of synchrotron radiation in physics, chemistry, material science, biology and medicine.

The topics of the meeting include

- synchrotron radiation in nanoscience
- x-ray absorption, fluorescence and photoelectron spectroscopies
- x-ray magnetic dichroism
- x-ray diffraction: methods and applications
- macromolecular crystallography
- synchrotron radiation in life sciences
- applications of free electron lasers
- synchrotron and alternative radiation sources - instrumentation

The scientific [programme](#) of the Symposium includes invited lectures, oral presentations and poster sessions.

The International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science takes place in Poland every two years since 1992. It is devoted to recent advances and new techniques employing synchrotron radiation in physics, chemistry, materials science, biology and medicine. The aim of this conference is to propagate the newest possibilities and achievements of the synchrotron related science as well as to enable the participants to learn and share the knowledge. Among the invited speakers are usually the specialists from synchrotron centers and the experts in different applications of the synchrotron radiation.

From the very first ISSRNS meeting organized in 1992, the idea of dissemination of knowledge on synchrotron radiation applications in Poland and integration of the community of Polish synchrotron radiation users proved to be very popular and successful. Nowadays, when Polish scientists carry out experiments in many synchrotron laboratories all over the world and have become members of the international community of synchrotron radiation users, these conferences transformed into a forum of sharing new results, new ideas of experiments and starting collaboration. Nevertheless, it partly retained its original character of "first step to synchrotron radiation" for our young colleagues. Of course, ISSRNS meetings owe their success mainly to the lecturers from various synchrotron and scientific centers in the world, in particular: J. Dove, V. Holý, G. Margaritondo, N. Mårtensson, G. Materlik, T.H. Metzger, D.L. Nagy, P.-O. Nilsson, J. Nordgren, B. Ravel, J.J. Rehr, W. Stirling, M. Taniguchi, E. Weckert, and many others.

Conference Venue

The meeting will be held in a comfortable FERO EXPRESS Hotel which is a new fully-equipped three-star object. It is situated in the natural surroundings of the Royal City of Kraków. The hotel's facilities include seven conference rooms, a drink bar, a small and big restaurant with a green garden with alleys and benches. A free, monitored car park is also available for the guests. The FERO EXPRESS Hotel is situated near The Benedictine Abbey in Tyniec, by the Vistula River, next to a leisure center

with a sports hall, an indoor swimming pool, fitness facilities and a state-of-the-art kayak and raft course.

The hotel is located 5 km from the Balice airport, next to the Kraków ringroad exit (A4 Tyniec junction) and only a dozen minutes by car or bus away from the center of the City. We hope to host you in Poland in 2012.

INTERNATIONAL ADVISORY BOARD

- Dieter Einfeld, Barcelona, Spain
- Pawel Grochulski, Saskatoon, Canada
- Jürgen Härtwig, Grenoble, France
- Udo Heinemann, Berlin, Germany
- Krystyna Jabłońska, Warszawa, Poland
- Marek Jeżabek, Kraków, Poland
- Augusto Marcelli, Frascati, Italy
- Vaclav Petricek, Praha, Czech Republic
- Kenya Shimada, Hiroshima, Japan
- Hiromitsu Tomizawa, Spring-8, Japan

PROGRAMME COMMITTEE

- Andrzej Burian, Katowice, Poland
- Edward A. Gölich, Kraków, Poland
- Krystyna Jabłońska, Warszawa, Poland
- Bogdan Kowalski, Warszawa, Poland
- Maciej Kozak, Poznań, Poland
- Andrzej Kisiel, Kraków, Poland
- Wojciech M. Kwiatek, Kraków, Poland
- Bronisław Orłowski, Warszawa, Poland
- Czesława Paluszkievicz, Kraków, Poland
- Wojciech Paszkowicz, Warszawa, Poland
- Paweł Piszora, Poznań, Poland
- Jacek Szade, Katowice, Poland
- Anna Wolska, Warszawa, Poland
- Danuta Zymierska, Warszawa, Poland

ORGANIZING COMMITTEE

- Wojciech M. Kwiatek, Kraków, Poland - Chairman
- Czesława Paluszkievicz, Kraków, Poland - Secretary
- Jakub Bielecki, Kraków, Poland
- Joanna Czapla, Kraków, Poland
- Maciej Kozak, Poznań, Poland
- Janusz Lekki, Kraków, Poland
- Ewelina Lipiec, Kraków, Poland
- Wojciech Paszkowicz, Warszawa, Poland
- Anna Zachara, Kraków, Poland
- Arkadiusz Zarzycki, Kraków, Poland

CONTACT

Prof. Wojciech M. Kwiatek – chairman
Dr. Czesława Paluszkievicz – scientific secretary
Institute of Nuclear Physics PAN
ul. Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków, Poland
Tel. +48 126628235, fax: +48 126628089
e-mail: issrms2012@ifj.edu.pl
web page: <http://issrms2012.ifj.edu.pl>



Bruker **Polska** Sp. z o.o.

Aparatura naukowa i badawcza...

Aplikacje Sprzedaż Serwis



- kontrola jakości
- badania i rozwój
- life science
- kontrola procesów

Odwiedź nas na stronie internetowej www.bruker.pl lub zadzwoń (61) 868 90 08

think forward

NMR/EPR/MS/X-RAY/OES/CS-ONH

Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego (PTPS)

Siedziba:

ul. Radzikowskiego 152
31-342 Kraków
tel. (0) 12 662 82 35

Nr konta bankowego:

Bank PeKaO SA I Oddział w Krakowie
80 1240 1431 1111 0000 1045 5083

Adres do korespondencji:

Dr Danuta Żymierska
Instytut Fizyki PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa
tel/fax: (0) 22 843 60 34
e-mail: zarzad@synchrotron.org.pl
<http://www.synchrotron.org.pl>

Składki członkowskie dla członków zwyczajnych:

Wysokość składek członkowskich
(od 1 stycznia 2009 r.):
Samodzielni pracownicy naukowcy – 50 zł
Doktorzy – 40 zł
Pozostali – 30 zł

Zarząd Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego (Kadencja: 2008 – 2011)

Prezes:

Prof. dr hab. Krystyna Jabłońska
Instytut Fizyki PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa
e-mail: jablo@ifpan.edu.pl

Wiceprezes:

Prof. dr hab. Andrzej Burian
Instytut Fizyki
Uniwersytet Śląski
ul. Uniwersytecka 4
40-007 Katowice
e-mail: burian@us.edu.pl

Wiceprezes:

Dr hab. Maciej Kozak
Wydział Fizyki
Uniwersytet im. A. Mickiewicza
ul. Umultowska 85
61-614 Poznań
e-mail: mkozak@amu.edu.pl

Sekretarz:

Dr Danuta Żymierska
Instytut Fizyki PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa
e-mail: zymier@ifpan.edu.pl

Skarbnik:

Prof. dr hab. Wojciech Kwiatek
Instytut Fizyki Jądrowej PAN
ul. Radzikowskiego 152
31-142 Kraków
e-mail: wojciech.kwiatek@ifj.edu.pl

Wydawca:

Dr hab. Wojciech Paszkowicz
Instytut Fizyki PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa
e-mail: paszk@ifpan.edu.pl

Członek Zarządu ds. Strony

Internetowej:
Dr inż. Anna Wolska
Instytut Fizyki PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa
e-mail: wolska@ifpan.edu.pl

Członkowie:

Dr hab. Edward A. Görllich
Instytut Fizyki
Uniwersytet Jagielloński
ul. Reymonta 4
30-059 Kraków
e-mail: edward.gorlich@uj.edu.pl

Dr hab. Bogdan Kowalski
Instytut Fizyki PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa
e-mail: kowab@ifpan.edu.pl

Prof. dr hab. Bronisław Orłowski
Instytut Fizyki PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa
e-mail: orbro@ifpan.edu.pl

Dr hab. Paweł Piszora
Wydział Chemii
Uniwersytet im. A. Mickiewicza
ul. Grunwaldzka 6
60-780 Poznań
e-mail: pawel@amu.edu.pl

Zawiadomienie

Walne Zebranie Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego

Zapraszamy na Walne Zebranie PTPS, które odbędzie się w trakcie 9. *Krajowego. Sympozjum Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego* w Auli Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie w poniedziałek, 26 września 2011 roku o godz. 17.00 w pierwszym terminie i o godz. 17.15 w drugim terminie, z podanym poniżej porządkiem obrad.

Sekretarz PTPS
D. Żymierska

Prezes PTPS
K. Jabłońska

Porządek obrad:

1. Powitanie uczestników i przyjęcie porządku obrad.
2. Wybór przewodniczącego Zebrania i protokolanta.
3. Sprawy członkowskie.
4. Sprawozdanie merytoryczne ustępującego Zarządu PTPS.
5. Sprawozdanie finansowe Zarządu.
6. Sprawozdanie Komisji Rewizyjnej.
7. Dyskusja nad sprawozdaniami.

8. Głosowanie nad udzieleniem absolutorium ustępującemu Zarządowi PTPS.
9. Przygotowanie wyborów nowych władz Towarzystwa.
10. Informacja o przygotowaniach do XI ISSRNS w Krakowie w 2012 r.
11. Informacja o zgłoszeniu Krakowa jako lokalizacji konferencji XAFS17.
12. Sprawy bieżące.
13. Wolne wnioski.



Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego

istnieje od 1991 roku

Naszym celem jest:

Wymiana informacji na temat badań prowadzonych przy użyciu promieniowania synchrotronowego przez polskich naukowców, osiąganych przez nich wyników i publikacji naukowych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym

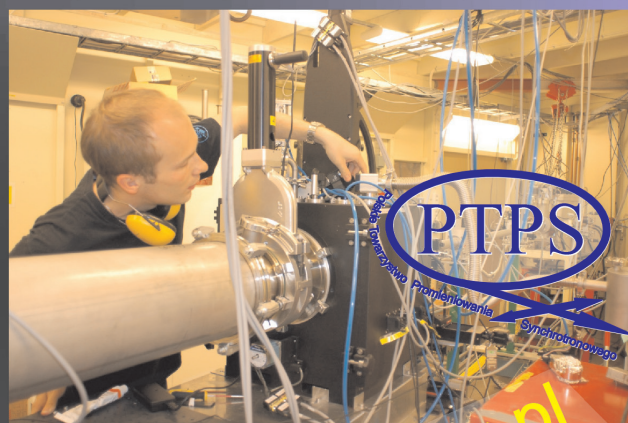
Działania na rzecz szkolenia młodej kadry polskich studentów, doktorantów i naukowców w zagranicznych ośrodkach synchrotronowych

Wymiana doświadczeń w zakresie popularyzacji wiedzy na temat badań prowadzonych przy użyciu promieniowania synchrotronowego

Pomoc w organizowaniu dostępu polskich naukowców do źródeł promieniowania synchrotronowego

Koordinacja działalności informacyjnej dotyczącej możliwości pomiarowych powstającego w Polsce ośrodka synchrotronowego i aktywizacja młodej kadry naukowej w tym zakresie

Organizowanie konferencji i innych imprez naukowych



www.synchrotron.org.pl

