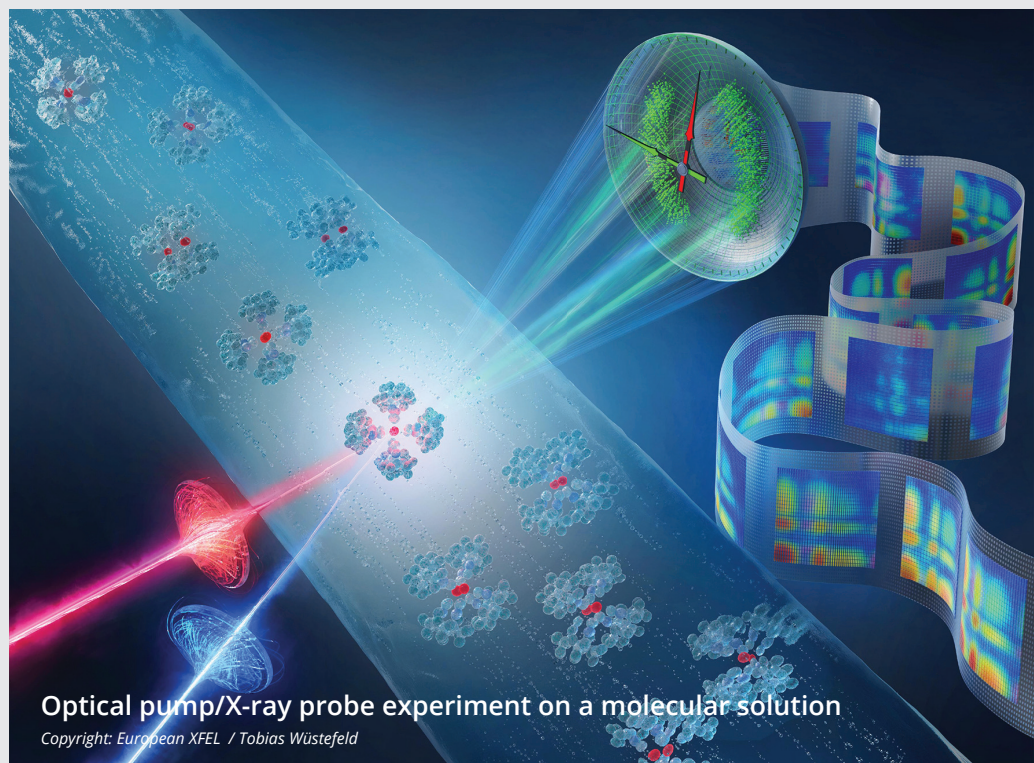




polish synchrotron
radiation society

SYNCHROTRON RADIATION IN NATURAL SCIENCE

Bulletin of Polish Synchrotron Radiation Society



Optical pump/X-ray probe experiment on a molecular solution

Copyright: European XFEL / Tobias Wüstefeld

ISSN 1644-7190

vol. 23, December

20
23

Layout and cover design by J. Kowalik
Cover photo by various photographers
ISSN 1644-7190

Dear Readers,

On behalf of the Editorial Team, it is my pleasure to deliver the next issue of Synchrotron Radiation in Natural Science. Since the year 2002 Polish Synchrotron Radiation Society publishes the journal with content covering recent developments in instrumentation related to synchrotron radiation and X-ray Free Electron Laser sources. It also provides a forum for reporting the most recent achievements in fundamental and applied research, such as novel applications in physics, chemistry, materials science, biology, and medicine.

The release of the recent issue aims at enhancing the platform for knowledge exchange within Polish as well as the international scientific community. In the present issue, we report on the initiative “Light for Ukraine”, on the opportunities to access X-ray Free Electron Laser in Hamburg and the European Synchrotron On behalf of the Editorial Team, it is my pleasure to deliver the next issue of Synchrotron Radiation in Natural Science. Since the year 2002 Polish Synchrotron Radiation Society publishes the journal with content covering recent developments in instrumentation related to synchrotron radiation and X-ray Free Electron Laser sources. It also provides a forum for reporting the most recent achievements in fundamental and applied research, such as novel applications in physics, chemistry, materials science, biology, and medicine.

On behalf of Editorial Team,
Jakub Szlachetko

Director of the SOLARIS
National Synchrotron
Radiation Centre

Editorial Team



Editor-In-Chief
Jakub Szlachetko

Director of the SOLARIS
National Synchrotron
Radiation Centre



Co-Editor
**Edyta
Piskorska-Hommel**

Institute of Low Temperature
and Structure Research
Polish Academy of Sciences



Co-Editor
Anna Wolska

Institute of Physics of the Polish
Academy of Sciences



Co-Editor
Ryszard Sobierajski

Institute of Physics of the Polish
Academy of Sciences



Co-Editor
Agnieszka Cudek

SOLARIS National Synchrotron
Radiation Centre



Graphics & Style
Joanna Kowalik

SOLARIS National Synchrotron
Radiation Centre

Light for Ukraine – synchrotron online workshop at SOLARIS

Jakub Szlachetko

SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre



Figure 1. The meeting *Light for Ukraine* was attended by almost 250 people, of which over 170 people represented the Ukrainian scientific community.

Since February 2022, with the invasion of Russia in Ukraine, the activity of the scientific society in Ukraine has been heavily impacted, limiting the realization of research projects on both national and international levels. The European and Intercontinental scientific community is making numerous efforts to support Ukrainian researchers' projects at home and in exile.

In light of the current situation, the League of European Accelerator Based-Photon Sources – LEAPS – initiated dedicated activities to support Ukrainian researchers performing their projects using Synchrotrons and Free Electron Lasers. During the LEAPS Plenary Meeting held at Paul Scherrer Institute (Villigen, Switzerland) on 26-28 October 2022, LEAPS Board expressed a strong desire to support Ukrainian scientific efforts and designated SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre as a coordinating facility to implement and supervise the activities aiming at consolidation and strengthening of the Ukrainian users' community.

In this context, SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre in Krakow, together with the National Academy of Sciences of Ukraine, was organizing a meeting called "Light for Ukraine – synchrotron workshop at SOLARIS" which was held on 23-24th February 2023 as an online event. The workshop aimed to establish scientific collaboration, exchange concepts of future developments, and discuss research areas that can be supported and reinforced within LEAPS-Ukraine cooperation. The agenda of the meeting covered presentations of SOLARIS scientists describing the facility's capabilities and presentations of Ukrainian researchers on scientific areas of interest.

The workshop was met with great interest, not only by scientists from Ukraine, but also by researchers from all over the world. The huge support of the boards of many centers of the third and fourth generation of light sources exceeded our wildest expectations. It is worth noting that the meeting was attended by almost 250 people, of which over 170 people represented the Ukrainian scientific community. The meeting received wide coverage in the international community, and the SOLARIS Center receives expressions of appreciation and proposals of support for the initiative undertaken so far.

This event and the presentations of representatives of the Ukrainian side, including in particular the president of the Ukrainian Academy of Sciences, made the international scientific community aware of how great losses scientists in Ukraine suffer, not only in terms of limited access to research centers and opportunities for international exchange, but also in the area of scientific infrastructure. During the meeting, we saw photos of the building and apparatus infrastructure, destroyed by bombing and the activities of the Russian occupation, belonging to both the Academy of Sciences and many other institutes and universities. At the same time, the scientific community presented very unique, world-class research results in the field of materials, new technologies, advanced computational methods and research

in the field of biomedicine, thus initiating extensive discussions on the challenges of modern science.

As part of the meeting and panel discussions, an initiative to build a dedicated beamline at National Synchrotron Radiation Facility in Krakow that will support consolidation of the Ukrainian society around photon-based research and can open a new chapter in the cooperation of our research communities. It is worth noting that several synchrotron centers expressed their will to support infrastructural and consider the possibility of co-financing a dedicated research beamline at the SOLARIS center.

Europejski Rentgenowski Laser na Swobodnych Elektronach – nowe perspektywy dla przełomowych badań rentgenowskich

Ryszard Sobierajski¹, Wojciech Gawęda², Katarzyna Jarzemska³, Radosław Kamiński³, Maciej Kozak², Jacek Kubicki², Dagmara Milewska⁴

1 Instytut Fizyki Polska Akademia Nauk

2 Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

3 Uniwersytet Warszawski

4 Narodowe Centrum Badań Jądrowych

Laboratorium Europejskiego Rentgenowskiego Lasera na Swobodnych Elektronach (ang. EuXFEL) jest jednym z największych projektów naukowych realizowanych obecnie na świecie i zostało zaliczone przez Europejskie Strategiczne Forum ds. Infrastruktury Badawczej (ESFRI, <https://www.esfri.eu/>) do głównych urzędzeń badawczych Europy. Unikatowe możliwości badawcze EuXFEL przyciągają najlepszych naukowców z całego świata i sprzyjają realizacji ambitnych wyzwań naukowych. Badania prowadzone w EuXFEL przyczyniają się do powstania nowej wiedzy w wielu dyscyplinach nauki i technologii wpływających na nasze codzienne życie, m.in. w medycynie, farmakologii, chemii, materiałoznawstwie, nanotechnologii, energetyce i elektronice.

Naukowcom realizującym badania w EuXFEL udostępnionych zostało aktualnie siedem nowoczesnych instrumentów naukowych nazywanych stacjami badawczymi (poniższe informacje zaczerpnięto m.in. ze strony www.xfel.eu, gdzie znaleźć można więcej szczegółów). Każda ze stacji jest dedykowana specyficznej tematyce badawczej i określonej typowi eksperymentów. Stacje badawcze EuXFEL są na stałe przypisane do trzech źródeł promieniowania XFEL o odmiennych parametrach definiujących trzy linie eksperymentalne (beamlines): SASE1 i SASE2 działające w zakresie twardego promieniowania rentgenowskiego (o energiach fotonów od 3 do 25 keV) oraz SASE 3 przeznaczone do generacji miękkiego promieniowania rentgenowskiego w zakresie od 260 eV do 3000 eV.

Linia eksperymentalna SASE1 zawiera dwie stacje badawcze: SPB/SFX (Single Particles, clusters and Biomolecules/Serial Femtosecond Crystallography) i FXE (Femtosecond X-ray Experiments). Pierwsza z nich przeznaczona jest do badań strukturalnym biocząsteczek, takich jak pojedyncze biomolekuły, kapsydy wirusów, fragmenty komórek i tkanek, lub mikroorganizmy. Ponadto wykonywane są również badania bardziej podstawowych układów, o dużym znaczeniu dla materiałoznawstwa, takich jak nanokryształy i klastry atomowe. Aparatura naukowa dostępna w stacji SPB/SFX pozwala na analizę dwu- i trójwymiarowych struktur pojedynczych cząsteczek w fazie gazowej oraz skondensowanej. Możliwe jest np. rejestrowanie spójnych obrazów dyfrakcyjnych skomplikowanych układów biologicznych, np. makrocząstek białek, z wysoką rozdzielczością przestrzenną (< 1 nm) konieczną do uzyskania pełnej informacji strukturalnej, niezbędnej do dokładnego poznania i zrozumienia ich funkcji biologicznej. W drugiej stacji badawczej, FXE, naukowcy skupiają swoją uwagę na czasowo-rozdzielczych badaniach ultraszybkich procesów fizyko-chemicznych zachodzących w fazie ciekłej lub skondensowanej. Tematyka badawcza FXE związana jest z dynamiką reakcji fotochemicznych i przejść fazowych w zakresie femto- i pikosekundowym oraz ze stanami materii charakteryzującymi się krótkimi czasami życia. Jednoczesne użycie laserów optycznego i rentgenowskiego w układzie pompa-sonda (pump-probe) pozwala na rejestrację ultraszybkiej dynamiki zjawisk zachodzących w badanym układzie jako „filmów molekularnych” obrazujących m.in. przebiegające reakcje chemiczne lub przejścia fazowe.



Rysunek 2. Propagacja wiązki promieniowania rentgenowskiego, generowanej przez European XFEL, w powietrzu powoduje jonizację cząsteczek azotu i w konsekwencji ich niebieską fluorescencję. Podobnemu efektowi zawdzięczamy niebieską barwę zórcz polarnych (ich dominujący zielony kolor pochodzi od fluorescencji tlenu). Pomimo tego, że emitowana wiązka promieniowania rentgenowskiego jest niezwykle intensywna, indukowane „świecenie” cząsteczek azotu jest nadal bardzo słabe i wymaga długiego czasu ekspozycji aparatu fotograficznego.

Źródło: Copyright: European XFEL / Jan Hosan

Linia eksperymentalna SASE2 zawiera kolejne dwie stacje badawcze pracujące w zakresie twardego promieniowania X: MID (Materials Imaging and Dynamics) i HED (High Energy Density). Stacja MID jest zoptymalizowana do prowadzenia eksperymentów w dziedzinie fizyki i chemii materiałowej oraz nanotechnologii. Z kolei stacja HED oferuje naukowcom wyjątkowe możliwości wykonywania doświadczeń przy użyciu wiązek rentgenowskich, w celu badania „egzotycznych” stanów materii otrzymywanych w ekstremalnych warunkach ciśnienia, temperatury, pola elektrycznego lub magnetycznego, generowanych przy wykorzystaniu optycznych laserów o bardzo wysokiej energii oraz impulsowych źródeł pól magnetycznych. Wśród możliwych zastosowań naukowych wymienia się m.in. badania nad stanami materii obecnymi w planetach przysłonecznych, nowymi fazami wysokociśnieniowymi materii ważnymi w kontekście geofizyki, plazmami o wysokiej gęstości oraz przejściami fazowymi w złożonych ciałach stałych pod wpływem bardzo wysokiego pola magnetycznego. Szczególną rolę odgrywają tu procesy nieliniowe i krótko-żyjące stany przejściowe materii, nieuchwytnie dla innych narzędzi diagnostycznych.

Ostatnia z istniejących linii eksperymentalnych, SASE3, oferuje możliwości prowadzenia badań z wykorzystaniem miękkiego promieniowania X w trzech stacjach badawczych: SCS (Spectroscopy and Coherent Scattering), SQS (Small Quantum Systems) i SXP (Soft X-ray Port). Pierwsza z nich umożliwi badania struktury elektronowej i atomowej oraz dynamiki procesów zachodzących w nanomateriałach i miękkiej materii skondensowanej oraz układach biologicznych o strukturze nieperiodycznej. Możliwe jest zmierzenie dwu- i trójwymiarowej struktury materii miękkiej, materiałów magnetycznych, nanocząsteczek oraz kompleksów supramolekularnych i biomolekuł z rozdzielczością przestrzenną rzędu 10 nm. Prowadzone są tu badania dynamiki ultraszybkich procesów magnetyzacji w nanomateriałach oraz struktur elektronowych w złożonych materiałach w fazie stałej. W drugiej stacji badawczej na linii SASE3, SQS, badane są podstawowe mechanizmy oddziaływań atomów, jonów i klastrów atomowych z silnymi polami elektromagnetycznymi. SQS umożliwi naukowcom z dziedzin fizyki atomowej i molekularnej badanie nieliniowych procesów indukowanych przez wiązki promieniowania rentgenowskiego. Głównym

atutem stacji badawczej SXP jest czasowo-rozdzielcza rentgenowska spektroskopia fotoelektronowa, która pozwala m.in. na badania dynamiki procesów zachodzących na powierzchniach materiałów i w interfejsach (granicach faz). Umożliwia ona również analizę produktów pośrednich w katalizatorach biologicznych i nieorganicznych, wykorzystywanych do aktywacji wiązań chemicznych za pomocą spektroskopii fluorescencyjnej. Innym ciekawym tematem badań realizowanych na stacji SXP i są pomiary wysoko naładowanych jonów w dziedzinie astrofizyki.

Dostęp do stacji badawczych EuXFEL uzyskiwany jest na podstawie konkursów projektów organizowanych dla każdego z instrumentów osobno. Podstawowym kryterium konkursowym jest jakość proponowanych badań (tzw. doskonałość naukowa). Konkursy mają charakter otwarty, są skierowane do międzynarodowej społeczności naukowej i stoją na najwyższym, światowym poziomie. W 2022 roku czas pomiarowy przyznano około 100 grupom badawczym (typowo ok. 60 godzin eksperymentalnych na grupę), co stanowi około 30% ogólnej liczby złożonych projektów. Warto podkreślić, że z uwagi na uczestnictwo Polski w corocznych składkach na XFEL, polscy naukowcy mają zapewniony preferowany dostęp do części czasu pomiarowego (choć w dalszym ciągu na drodze konkursowej).

Wśród polskich użytkowników już realizujących ambitne programy naukowe związane z wykorzystaniem infrastruktury EuXFEL są grupy badawcze z m.in.: Instytutu Fizyki PAN, Instytutu Fizyki Jądrowej PAN, Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej, Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza, Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie, Wydziału Fizyki Uniwersytetu w Białymstoku. Równocześnie naukowcy z 21 uczelni oraz instytucji naukowych i przemysłowych rozpoznają potencjał naukowy związany z tą infrastrukturą i planują jej zastosowanie do własnych badań. Łącznie polscy badacze zainteresowani wykorzystaniem EuXFEL reprezentują 28 jednostek, tworzących konsorcjum naukowo-przemysłowe XFEL-Polska. Jego członkowie, wspólnie przez wiele lat podejmowali inicjatywy mające na celu przygotowania polskiej kadry naukowej do pełnego wykorzystania nowych możliwości badawczych oferowanych przez EuXFEL. Zwieńczeniem tych działań w ostatnim czasie było wystąpienie przez 4 jednostki naukowe (Narodowe Centrum Badań Jądrowych, Instytut Fizyki PAN, Uniwersytet Warszawski oraz Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu) z wnioskiem do Ministerstwa Edukacji i Nauki w ramach programu „Wsparcie udziału polskich zespołów naukowych w międzynarodowych projektach infrastruktury badawczej”. Wniosek ten został zaakceptowany i w dniu 22 grudnia 2022 została zawarta umowa o finansowaniu. Projekt jest zaplanowany na lata 2022-26, i ma na celu nie tylko opłacenie polskiej składki członkowskiej w EuXFEL (~2% rocznego budżetu) i związane z tym sprawowanie funkcji nadzorczych w organach EuXFEL, ale także przygotowanie polskiej kadry naukowej do pełnego wykorzystania nowych możliwości badawczych oferowanych przez EuXFEL. Nie jest to łatwe, ponieważ obok szerokich możliwości naukowych, badania z użyciem EuXFEL wiążą się z nowymi wyzwaniami, przed którymi stają naukowcy. Ich przewyciężenie wymaga dużego nakładu pracy związanej z zapoznaniem się z najnowocześniejszymi technikami doświadczalnymi, metodami akwizycji i analizy danych oraz modelowania teoretycznego. Nie jest bowiem możliwe proste przeniesienie doświadczenia uzyskanego z wykorzystaniem układów laboratoryjnych. Przydatne jest także nawiązanie współpracy naukowej z liderami badań z użyciem XFEL, zarówno na świecie, jak i w Polsce.

Aby obniżyć wymagania stojące przed nowymi użytkownikami XFEL, w grantach MEiN zaplanowane zostały środki finansowe na (bezpośrednie) wsparcie polskich naukowców w przygotowaniu wysokiej jakości projektów naukowych i uzyskaniu czasu pomiarowego w EuXFEL. Obejmuje ono następujące działania:

- szkolenia w zakresie podstawowej wiedzy o zastosowaniach XFEL i używanych technik badawczych, w tym kilkumiesięczne staże dla młodych pracowników naukowych w instytucjach biorących udział w badaniach z użyciem XFEL oraz wykład nt. XFEL dla studentów II stopnia i doktorantów;
- udział polskich naukowców w konferencjach i warsztatach o tematyce dot. badań z użyciem XFEL;
- pomoc w nawiązaniu lub poszerzeniu kontaktów naukowych z pracownikami EuXFEL i/lub grupami badawczymi realizującymi podobne badania w Polsce i na świecie;
- pomoc w przygotowaniu projektów badawczych w konkursach o czas pomiarowy na źródłach XFEL, także poprzez wykonanie badań pilotażowych i komplementarnych.

W ramach projektu powstała także Sieć Centrów Doskonałości w zakresie badań z użyciem XFEL (CD XFEL), zapewniające pomoc ekspercką ze strony doświadczonych użytkowników XFEL oraz odpowiednią infrastrukturę naukową. Sieć tworzą unikatowe laboratoria badawcze działające w czterech jednostkach naukowych realizujących grant ministerstwa. Centra skupiają naukowców posiadających duże doświadczenie w badaniach z wykorzystaniem XFEL, których wiedza i zaangażowanie stanowi wsparcie dla

nowych polskich użytkowników tej infrastruktury. Na potrzeby realizacji projektu CD XFEL udostępniają także swoją infrastrukturę badawczą. Z uwagi na specyfikę dotychczasowej działalności naukowej i dostępnej infrastruktury, każda z jednostek skupia się na wybranej tematyce badawczej:

- Centrum Doskonałości XFEL w IF PAN (w skrócie CD XFEL IFPAN) dedykowane jest badaniom w zakresie zmian strukturalnych materii skondensowanej pod wpływem temperatury i ciśnienia, związanych głównie z tematyką badań materiałowych realizowanych na instrumentach HED, FXE i MID w EuXFEL (np. ultraszybkich przemian strukturalnych jak topnienie, krystalizacja, czy też zeszklenie indukowanych sub-pikosekundowymi impulsami laserowymi).

- Centrum Doskonałości XFEL w UAM prowadzi działalność naukową w zakresie fotochemii oraz badań strukturalnych cząstek biologicznych. Pierwszy obszar obejmuje zastosowanie czasowo-rozdzielczej spektroskopii laserowej (femtosekundowej absorpcji przejściowej i emisji oraz czasowo-rozdzielczej transmitancji i reflektancji) w badaniach szerokiej gamy materiałów od małych cząsteczek po układy supramolekularne. Szczególna uwaga poświęcona będzie badaniom procesów i reakcji związanych z fotokatalizą, fotowoltaiką, indukowanych światłem przejść spinowych w roztworach i ciele stałym, w tym dla związków organicznych i organometalicznych. Drugi obszar dotyczy badań struktury i zmian konformacyjnych zachodzących w roztworach makrocząsteczek biologicznych (białka, kwasy nukleinowe, kompleksy makromolekularne) lub układach lipidowych (membrany biologiczne, nośniki leków itp.). W tym zakresie dominującą techniką badawczą jest niskokątowe rozpraszanie promieniowania rentgenowskiego. Proponowane obszary badawcze są związane z tematyką naukową realizowaną na stacjach, odpowiednio, FXE oraz MID i SPB w EuXFEL.

- Centrum Doskonałości XFEL w UW dedykowane jest badaniom w zakresie chemii i fizyki materiałów molekularnych wykazujących właściwości fotoaktywne (a także badaniom ich zmian pod wpływem temperatury i ciśnienia), ze szczególnym uwzględnieniem zmian strukturalnych wywołanych ciągłym i impulsowym naświetlaniem w kryształach małych cząsteczek (luminescencyjne kompleksy metali przejściowych, związki przełączalne itp.), modelowaniu teoretycznemu oraz rozwojowi metod procesowania danych pomiarowych i ich analizy w zakresie (czasowo-rozdzielczej) fotokrystalografii, w szczególności z użyciem promieniowania synchrotronowego i XFEL (np. z wykorzystaniem stacji badawczej FXE).

- Centrum Doskonałości XFEL w NCBJ (w skrócie CD XFEL NCBJ) dedykowane jest wsparciu polskich użytkowników EuXFEL w zakresie technik informatycznych związanych z przetwarzaniem danych eksperymentalnych uzyskanych w EuXFEL, ich udostępnianiem oraz analizą.

Stworzenie CD XFEL oraz opisane powyżej działania mają na celu przełamanie zasadniczej bariery dostępu polskiego środowiska naukowego do innowacyjnej infrastruktury badawczej jaką jest EuXFEL.

Osoby zainteresowane współpracą i uzyskaniem wsparcia w przygotowaniach do badań z użyciem EuXFEL prosimy o kontakt z kierownikiem merytorycznym projektu dr. hab. Ryszardem Sobierajskim, prof. IF PAN (ryszard.sobierajski@ifpan.edu.pl).

Polish contribution to the European Synchrotron Radiation Facility

Anna Wolska, Krystyna Ławniczak - Jabłońska

Institute of Physics of the Polish Academy of Sciences

The European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) needs no introduction to anyone applying synchrotron radiation in the research. It is currently the most modern research infrastructure located in Grenoble (France), first made available to users in 1994. The construction and operation of such unique and expensive research facility was possible thanks to the creation of an international consortium, which started financing the construction in 1988 and covers the costs of ongoing operation and modernization of the source and beamlines [1]. Polish scientists associated with Polish Synchrotron Radiation Society have been trying to make Poland part of this consortium since 1991.

Thanks to these activities, both at the scientific level (organization of many schools, symposia and specialized workshops in the field of synchrotron techniques) and at the administrative level (letters to the ministry, meetings with ministers, work in groups for large research facilities in the ministry, etc.), Poland

officially joined the ESRF Consortium in 2004 as an associate member with a contribution of 0.6% ESRF annual budget. It was the result of the efforts of the entire Polish synchrotron radiation community represented by prof. Krystyna Lawniczak-Jablonska from Institute of Physics Polish Academy of Sciences, who obtained funding for this purpose for the years 2004-2006 on the basis of an appropriate increase in the subsidy for the IP PAS.

In March 2006, the National Consortium of Scientific Institutions Interested in the Use of the European Synchrotron Radiation Source ESRF was established. The National Consortium initially involved 9 institutes:

1. Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw
2. Institute of Neurology, Collegium Medium, Jagiellonian University, Krakow
3. Faculty of Physics and Applied Computer Science, AGH University of Science and Technology, Kraków
4. Faculty of Applied Physics and Mathematics, Gdańsk University of Technology
5. Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Warsaw
6. Institute of Physics, University of Silesia, Katowice
7. Institute of Experimental Physics, Warsaw University
8. Faculty of Chemistry, Warsaw University
9. Institute of Paleobiology, Polish Academy of Sciences, Warsaw

Presently, the National Consortium involves 20 scientific institutes. Their representatives create the Council of National Consortium. The IP PAS serves as the coordinator.

In 2006, the IP PAS, as the coordinator of the National Consortium, obtained funding within a special project "Poland's participation in European Consortium of Synchrotron Radiation in Grenoble, France, with a contribution of 1% of the annual budget" for the years 2006-2009, later extended by an annex until 2011. A financial contribution of 1% guarantees 1% of the beamtime available at all beamlines. A settlement for each member is prepared every 3 years. In case more beamtime was granted, a request for additional payment or consent to limit beamtime in the next settlement period is sent. If there was less beamtime granted, there is more allocated in the next period.

In the years 2011-2016, after legal changes in science financing, there was no possibility to make the due contribution to the ESRF. Despite this, while waiting for the Ministry of Science and Higher Education to create an appropriate legal path, the ESRF management still allowed scientists with Polish affiliation to apply for beamtime.

In 2016, the IP PAS, as the coordinator of the National Consortium, obtained funds from the Ministry of Science and Higher Education by decision No. DIR/PM/2016/03 as part of the project called "Support for the participation of Polish research teams in the ESRF and CERN" in order to cover the costs of outstanding financial liabilities to the ESRF for the years 2011-2016.

In the same year, 2016, by decision No. DIR/WK/2016/19 of December 6, the IP PAS obtained funds from the Ministry of Science and Higher Education to finance the costs of the contribution to participate in a joint international project called "European Synchrotron Radiation Facility - Europejskie Centrum Promieniowania Synchrotronowego". These funds were settled as a grant, based on scientific results from experiments carried out at the ESRF, reported annually to a special commission at the Ministry of Science and Higher Education. Only after the annual report was approved were funds allocated for the next year. The funds were granted for 5 years. They included the Polish financial contribution to the ESRF budget in the amount of 1% of its annual budget. Thanks to the favorable Euro exchange rate during this period, despite the increase of the ESRF budget, we were able to pay the Polish contribution. The project also covered the costs of project management: maintaining the website, participating in the ESRF Council meetings, collecting the results of experiments and preparing reports to the ministry. The leader of this project was also prof. Krystyna Lawniczak-Jablonska. The website and secretarial support for the project was provided by MSc Joanna Libera. Prof. Wojciech Paszkowicz represented Poland in the Administrative and Financial Committee of the ESRF.

In 2015, as a result of the efforts of the IP PAS, ESRF was included on the Polish Roadmap for Research Infrastructures. Poland's participation in the ESRF was also included in the next edition of the Roadmap approved by the Ministry of Science and Higher Education on January 24, 2020.

In 2021, as part of the program of the Ministry of Education and Science "Support for the participation of Polish research teams in the international research infrastructure projects", IP PAS, on behalf of the

National Consortium, obtained a grant titled "Polish contribution to the European Synchrotron Radiation Facility" (AGREEMENT No. 2021/WK/11). As part of the grant, Poland pays 1% of the contribution to the ESRF annual budget. This keeps open the possibility for scientists with Polish affiliation to apply for beamtime. Application for this project and reporting its results to the Ministry of National Education and Science is taken care by PhD Anna Wolska who also represents Poland at the ESRF Council. Project's website is led by MSc Joanna Libera while MSc Anna Reszka represents Poland in the Administrative and Financial Committee.

The ESRF accepts applications for individual projects twice a year: by March 1 and September 10. The scientific program of research conducted at the ESRF is determined by the International Peer Review Committee by ranking the submitted experimental proposals. The Committee is divided on 12 Allocation Panels consisting of outstanding international experts. The final decision on the selection of proposals for implementation is made by the Director General after seeking the opinion of beamline scientists as to the technical feasibility of implementing the project and taking into account the use of beamtime due by a given country in accordance with the contribution made. In the case of projects carried out in international cooperation, beamtime is counted proportionally for a given country, depending on the affiliation of scientists participating in the project, regardless of whether all listed in the project directly participated in the experiment.

Access to the beam for scientists from countries belonging to the ESRF Consortium is covered by contributions paid by individual countries. Additionally, the travel and subsistence expenses of the three researchers carrying out the experiment are also paid. Scientific projects that have been granted beamtime receive technical and other necessary assistance during the preparation and conduct of the experiment. The currently implemented ministry grant, in addition to financing a 1% contribution to the ESRF, also offers co-financing for participation in conferences for scientists with Polish affiliation presenting the results of research conducted at the ESRF. The intention is to make it easier for Polish scientists to present the results of their research both internationally and domestically and to establish new scientific contacts at home and abroad. The funding regulations are available on the project website: <http://www.ifpan.edu.pl/esrf/>

Research results presented at conferences or published in scientific journals must include acknowledgments to the ministry grant financing Poland's access to the ESRF. Exemplary formula: The access to the ESRF was financed by the Polish Ministry of Education and Science, dec. no. 2021/WK/11.

Information about publications, conference presentations, the fact of including the results in a doctoral dissertation or the achievements included in the habilitation should be sent to MSc Joanna Libera (esrf-polska@ifpan.edu.pl). These are measurable project results that influence whether the ministry will continue financial support, and therefore whether Polish scientists will continue to have access to the ESRF.

[1] Anna Wolska and Wojciech Paszkowicz "Poland at the European Synchrotron Radiation Facility: 30 years of history and future prospects" Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society 22 (2022) 15.

Estimation of Ternary Rock salt and Fluorite Structured Alloys with Site Occupation Preferences

B.V. Robouch^{a,*}, P. Robouch^b, A. Kisiel^{c,**}, P. Zajdel^{d,***}, A. Grilli^a and A. Marcelli^{a,e}

a INFN - Laboratori Nazionali Frascati, via E. Fermi 54, CP 13, 00044 Frascati (RM), Italy

b European Commission, Joint Research Centre, Retieseweg 111, 2440 Geel, Belgium

c Instytut Fizyki, im. Mariana Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloński, ul. Łojasiewicza 11, 30-348 Cracow, Poland

d Institute of Physics, University of Silesia, ul. 75 Pułku Piechoty 1, 41-500 Chorzów, Poland

e RICMASS - Rome International Center for Materials Science Superstripes, Via Sabelli 119A, 00185 Roma, Italy

*The main author died prior to the submission of this paper. This is his last scientific contribution.

**Corresponding author – Email: andrzej.kisiel@uj.edu.pl

*** Corresponding author-Email: pawel.zajdel@us.edu.pl

Keywords: Rock salt, Fluorite, Ternary alloys, $Cd_{1-x}Ca_xO$, $K_{1-x}Rb_xBr$, $Mg_{1-x}Ni_xO$, $RbBr_{1-x}I_x$, $Th_xNa_{1-x}F_{4r}$, $Th_{1-x}U_xO_2$, $Th_{1-x}Pu_xO_2$, site occupation preferences.

Abstract

A new method is proposed to estimate the Site Occupation Preferences (SOPs) of solid solutions of structured ternary alloys when experimental data within the full doping range are not available. To demonstrate the validity of this approach, we calculated SOP - W_k coefficients for seven alloys with the rock salt (B1) or the fluorite (C1) type structures based on the analysis of available experimental data and additional interpolated values. The limitations of the proposed approach are outlined and discussed.

1. Introduction

Robouch *et al.* developed the Statistical Strained Model (SSM) [1,2] to analyze local structures to clarify why many semiconductors exhibit Site Occupation Preferences (SOPs) with extreme values. This model indicates that some elemental configuration ternary filling is attenuated or missing. In its original form, the SSM [1] described the statistical distribution of dopant ions within solid solutions of tetrahedrally coordinated materials and considered the set of configurations $[\text{A}^k\text{B}^{N-k}\text{Z}^{N-k}]_{k=0,N}$ where N is the coordination and k the number of substituted ions. Materials crystallizing in diamond, sphalerite (B3) [3], wurtzite (B4) [4], or Heusler ($L1_2$) [5] structures, i.e., tetrahedrally coordinated systems, have their ions (all or some chosen sites) coordinated by $N = 4$ other ions forming a tetrahedron. The model was later extended [2] to any configuration $[\text{A}^k\text{B}^{N-k}\text{Z}^{N-k}]_{k=0,N}$ in structures with different coordination ($N \neq 4$), such as Laves phases (C15, with $N = 2$) [6], cubic Rock salt (B1, $N = 6$) [7] and also Fluorite ternary compounds (C1, $N = 8$) [8].

The structural coordination is often preserved at short range even when the materials lose their long-range crystalline structure and disordered phases appear. The preservation of the local coordination allows applying SSM to bulk systems and analyzing local structures of materials even in disordered states. Our previous study [9] demonstrated that some of the 21 ternary alloys of different structures show ideal quasi-canonical Bernoulli distributions, while many others are characterized by extreme preferences in which one, several or even all ternary configurations are depressed or lacking. These results showed that the Bernoulli distribution has limited validity and does not always apply. Yet, the reason for this is not well understood.

The Bernoulli distribution for ternary systems assumes that all the constituent elements are identical with an equal probability of occupying any configuration, with a minimum amplitude for the configuration $N/2$, a symmetry around it, and maxima at configurations 0 and N , with the amplitude set to 1.

The maxima of the Bernoulli distribution $\sum_{k=0}^N P_k(x)$ of each structure (e.g., $N=2, 4, 6, 8$) occur at contents $x = [k/N]_{k=1,N-1}$, at which sensitivity is optimal. Figure 1 illustrates the Bernoulli distribution for the ternary crystalline structure of cubic rock salt ($N = 6$) and fluorite ($N = 8$).

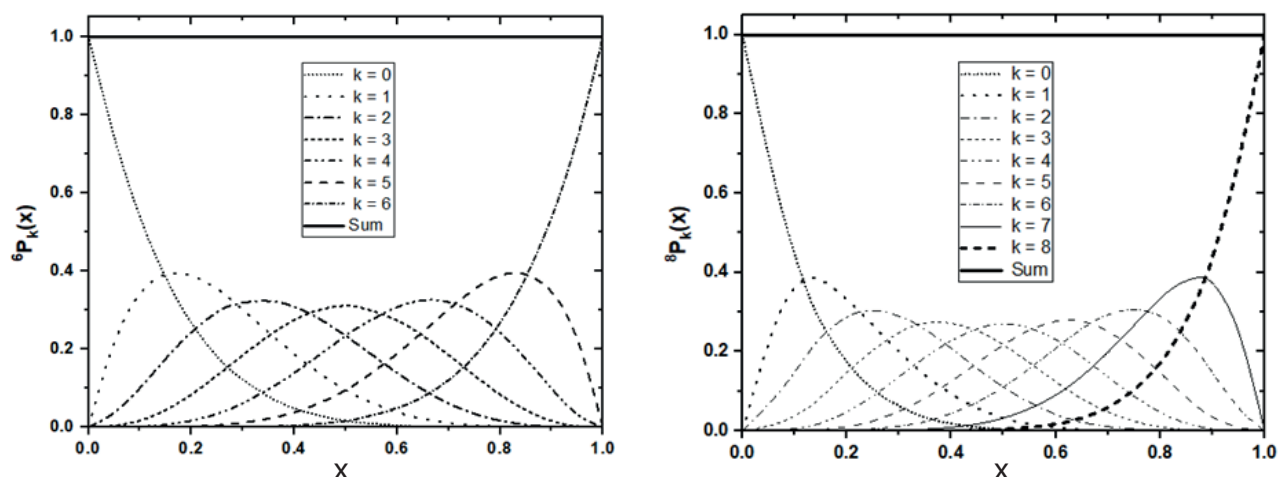


Figure 3. The Bernoulli distribution for ternary cubic rock salt ($N = 6$, left) and fluorite ($N = 8$, right) crystalline structures.

In real crystalline structures of various commonly considered elements, the distributions often depart from random, leading to SOPs. The SSM quantifies these distributions by non-negative $[W_k]_{k=1,N-1}$ coefficients. The latter are derived from the coordination numbers $N_i(x)$ or/and the bond distances $R_i(x)$, where x is the relative content of the dopant, $i=1$ indicates the Nearest Neighbors (NN) and $i=2$ the Next Nearest Neighbors (NNN) – experimentally probed by neutron scattering or Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS) spectroscopies.

A ternary ABZ alloy consists of two binary compounds (AZ and BZ), and (N-1) ternary configurations $[C_k]_{k=1, N-1}^{kA, (N-k)BT_N}$. Each $[C_k]_{k=1, N-1}^{kA, (N-k)BT_N}$ configuration is described by three parameters: $W_k, R_{1k, AZ}, R_{1k, BZ}$. A minimum of N-1 values ($= {}^N_{N-1}N$) of $N_i(x)$ or $3*(N-1)$ values ($= {}^N_{R-1}N$) of $R_i(x)$ are required to determine the complete set of W_k 's.

The corresponding attenuation coefficients $[C_k]_{k=1, N-1}$ are determined as follows: $C_k = \min [W_k; 1; (N-k*W_k) / (N-k)] \in [0; 1]$, where N is the configuration number of the alloy and k is the coordination number (ranging from 0 to N). $[C_k]_{k=1, N-1}$ describes the relative attenuation of $[C_k]_{k=1, N-1}^{kA, (N-k)BT_N}$ configuration with consequent enhancement of T_0^N and/or T_N^N . The mean value of all C_k values, ranging from 1 (for perfect random Bernoulli alloy) to 0 (when no alloying is observed), is a proper marker of the alloying degree of the original compounds.

Three related functions ($\Delta^0 P_A^N / (N-1)$; $\Delta^N P_B^N / (N-1)$; $\Sigma \Delta P_Z^N / (N-1)$) describe the fraction of the original compounds AZ and BZ that did not alloy into $A_{1-x}B_xZ$. The values of W_k parameters determine the distributions of $[C_k]_{k=1, N-1}^{kA, (N-k)BT_N}(x)$ configurations. SOPs are correlated to the intrinsic characteristics of the alloy under investigation. To estimate the SOPs of ternary Rock salt [10] or Fluorite structures, a total of 15 to 21 reliable experimental dataset is required. In practice, this is difficult to achieve. For this reason, we propose here an alternative approach based on the addition of data points obtained from the interpolation of the experimental data available.

2. Estimating SOPs of cubic rock salt and fluorite ternary structures

As mentioned above, a minimum number (${}^N_{N-1}N$ or ${}^N_{R-1}N$) of experimental data points are required to *fully* describe a ternary alloy. Therefore, 15 ($=3*(6-1)$) and 21 ($3*(8-1)$) data points are needed for B1 and C1 structures, respectively. When authors report only one of the two bond distances (R_{1A} or R_{1B}), the minimum number of data points required drops to 10 ($=2*(6-1)$) and 14 ($=2*(8-1)$), leaving R_1 undefined. This applies to the whole relative content range (from 0 to 1). Whenever data are reported for a limited concentration range, the resulting evaluations should not be extrapolated beyond this range.

When the number of experimental data points is insufficient, we suggest including additional interpolated data (i) assuming a monotonic behavior of the continuous function and (ii) using the available observations. Two methods have been applied:

- (1) the addition of a single data-point using a linear interpolation between the nearest two data-point;
- (2) the addition of several data-point using a second-degree polynomial fitting the experimental data.

When doing so, we recommend using only additional points corresponding to the proper Bernoulli maxima $[B^1_{\max} x_k = k/6]$ or $[C^1_{\max} x_k = k/8]$.

3. Results and discussion

Several publications have been identified in the literature providing experimental observations for bond distances (R_1) obtained by EXAFS for ternary rock salt alloys ABZ B1 (cf. $K_{1-x}Rb_xBr$ [7], $RbBr_{1-x}I_x$ [7], $Mg_{1-x}Ni_xO$ [10], $Cd_{1-x}Ca_xO$ [11]) and ternary fluorite structures ABZ C1 (cf. $Th_{1-x}Pu_xO_2$ [8], $Th_{1-x}U_xO_2$ [8], and $Th_{1-x}Na_{1-x}F_4$ [12,13]). Only very limited data sets ($x < 0.2$) were reported for $Zn_{1-x}Mg_xO$ [14] and $Ce_{1-x}Cu_xO_2$ [15].

Figure 2 shows the probability $[P_k^N(x)]$ plots and the bond distances $R_i(x)$ plots (between the center of the configuration and the considered constituent) as a function of x for the seven alloys mentioned above. Experimental observations reported in the literature are shown as full circles, while interpolated additional data are shown as open circles. Similarly, Table 1 (Rock salt alloys) and Table 2 (Fluorite structured alloys) list the calculated $W_k, R_{1k, AZ}$ and $R_{1k, BZ}$ values, describing the various configurations. The following conclusions can be drawn for the other alloys investigated:

For the rock salt B1 alloys (N = 6)

All configurations (except the ${}^{1Ni, 5Mg}T^6_O$) are observed in the $Mg_{1-x}Ni_xO$. Spectra collected for $Cd_{1-x}Ca_xO$ were all homogeneous and monotonous, ruling out any potential "inhomogeneity" at $x = 0.4$. This data-point was later excluded from the SOP calculation, thus resulting in a pure Bernoulli behavior, while $K_{1-x}Rb_xBr$ and $RbBr_{1-x}I_x$ display a non-Bernoulli behavior.

For the fluorite structured C1 alloys (N = 8)

$Th_{1-x}U_xO_2$ and $Th_{1-x}Pu_xO_2$ have an estimated mean C_k of 0.845 and $\Sigma \Delta P^8_O / 7$ of 32%. In the case of

the $\text{Th}_{1-x}\text{U}_x\text{O}_2$, $R_{1,\text{ThO}}$ and $R_{1,\text{PuO}}$ values were reported for $x_{\text{U}} \in [0; 1]$, while in the case of the $\text{Th}_{1-x}\text{Pu}_x\text{O}_2$ alloy the $R_{1,\text{ThO}}$ values were reported only for $x_{\text{Pu}} \in [0; 0.66]$ (see Fig. 2e). Nevertheless, the configurations ${}^{1\text{Pu},7\text{Th}}\text{T}_8^{\text{O}}$ and ${}^{1\text{Pu},7\text{Th}}\text{T}_8^{\text{O}}$ are expected to be dominant at $x > 0.66$.

As expected, EXAFS observations on molten state samples, such as $\text{Th}_x\text{Na}_{1-x}\text{F}_4$, show no phase transitions or phase separations. Four $R_{1,\text{NaF}}$ values were reported for $x_{\text{Th}} \leq 0.6$. Additional data points for calculation were interpolated using a second-degree polynomial. Even though the ${}^{2\text{Li},6\text{Th}}\text{T}_8^{\text{F}}$ and ${}^{1\text{Li},7\text{Th}}\text{T}_8^{\text{F}}$ configurations seem to be dominant, all P_k functions are shaded for $x_{\text{Th}} > 0.6$ (Fig. 2g). It is worth noting the consistent results obtained for Mg-doping for the two distinct B1 and C1 families. A vanishing contribution of ${}^{1\text{Mg},5\text{Ni}}\text{T}_6^{\text{O}}$ for $\text{Mg}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}$ is observed (Table 1). Similarly, a population of ${}^{1\text{Mg},5\text{Ni}}\text{T}_6^{\text{O}} \approx 0$ is obtained. In $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$, configuration ${}^{1\text{Mg},5\text{Zn}}\text{T}_6^{\text{O}}$ is evanescent while in $\text{K}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Br}$ [7] ${}^{5\text{K},1\text{Rb}}\text{T}_6^{\text{Br}} = 0.004$, as in $\text{RbBr}_{1-x}\text{I}_x$ ${}^{2\text{I},4\text{Rb}}\text{T}_6^{\text{Rb}} = 0$.

Table 1 The Statistical Strained Model (SSM) data for the ternary Rock salt alloy.

k	0	1	2	3	4	5	6	
Configuration	${}^{0\text{A},6\text{B}}\text{T}_Z^6$	${}^{1\text{A},5\text{B}}\text{T}_Z^6$	${}^{2\text{A},4\text{B}}\text{T}_Z^6$	${}^{3\text{A},3\text{B}}\text{T}_Z^6$	${}^{4\text{A},2\text{B}}\text{T}_Z^6$	${}^{5\text{A},1\text{B}}\text{T}_Z^6$	${}^{0\text{A},6\text{B}}\text{T}_Z^6$	Comment
$\text{Mg}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}$ [10]								Fig. 2a
W_k		1.001	0.495	1.331	1.260	0.069		Residue [#] = 2 E-6
C_k		1.000	0.495	0.669	0.479	0.069		$C_{\text{Mean}} = 0.54$
$R_{1,\text{NiO}}$ (Å)		2.118	2.061	2.129	2.100	2.022	2.089	
$R_{1,\text{MgO}}$ (Å)	2.105							
Each T_k^6 (%)	34.8	14.3	7.1	9.6	6.8	1.0	26.5	100 %
Binary (%)	34.8						26.5	61 %
$\text{Cd}_{1-x}\text{Ca}_x\text{O}$ [11]								Fig. 2b
W_k		1	1	1	1	1		Residue=1 E-6
C_k		1	1	1	1	1		$C_{\text{Mean}} = 1$
$R_{1,\text{CdO}}$ (Å)	2.347	2.353	2.368	2.352	2.389	2.388		
Each T_k^6 (%)	14.3	14.3	14.3	14.3	14.3	14.3	14.3	100 %
Binary (%)	14.3						14.3	29 %
$\text{K}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Br}$ [7]								Fig. 2c
W_k		5.52	1.90	1.05	1.49	1.20		Residue= 9 E-7
C_k		0.097	0.551	0.946	0.025	0.004		$C_{\text{Mean}} = 0.32$
$R_{1,\text{RbBr}}$ (Å)		0	3.315	3.400	1.502	1.200	3.430	
$R_{1,\text{KBr}}$ (Å)	3.300	3.406	3.287	3.350	3.468	3.265		
Each T_k^6 (%)	14.3	1.4	7.9	13.5	0.4	0.1	62.5	100 %
Binary (%)	14.3						62.5	76.8 %
$\text{RbBr}_{1-x}\text{I}_x$ [7]								Fig. 2d
W_k		0.16	0	1.89	1.31	1.10		Residue = 4 E-5
C_k		0.163	0	0.114	0.383	0.498		$C_{\text{Mean}} = 0.23$
$R_{1,\text{BrI}}$ (Å)		3.580	0	2.354	3.578	3.638	3.68	
$R_{1,\text{BrRb}}$ (Å)	3.42	3.849	3.535	4.213	3.381	3.563		
Each T_k^6 (%)	40.5	2.3	0	1.6	5.5	7.1	42.9	100 %
Binary (%)	40.5						42.9	83 %

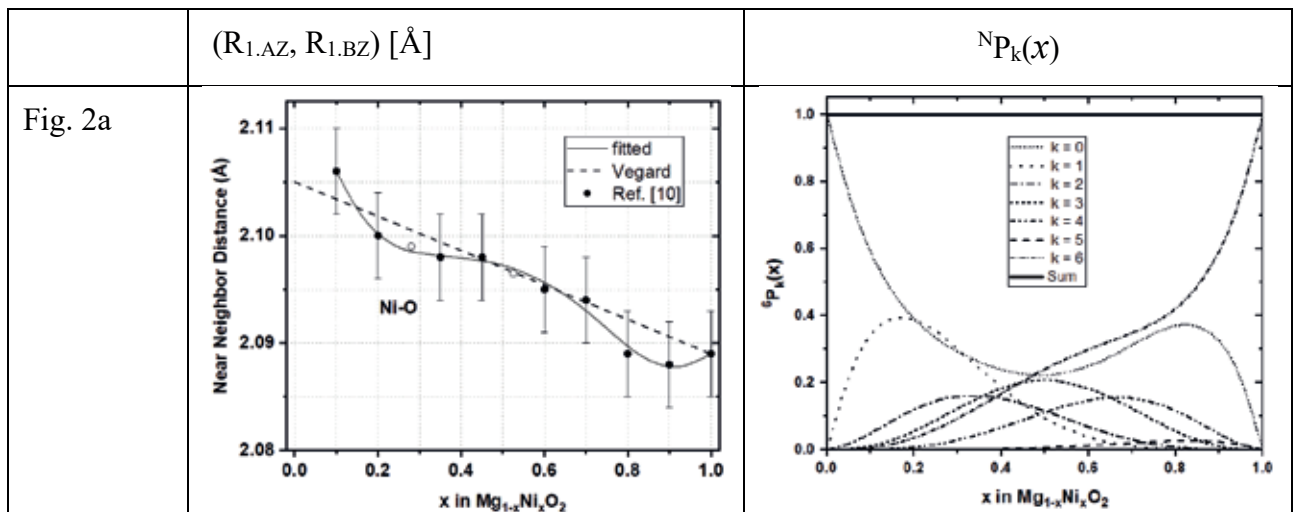
(#) Residue of Sum-square differences at convergence, computed using MS Excel Solver

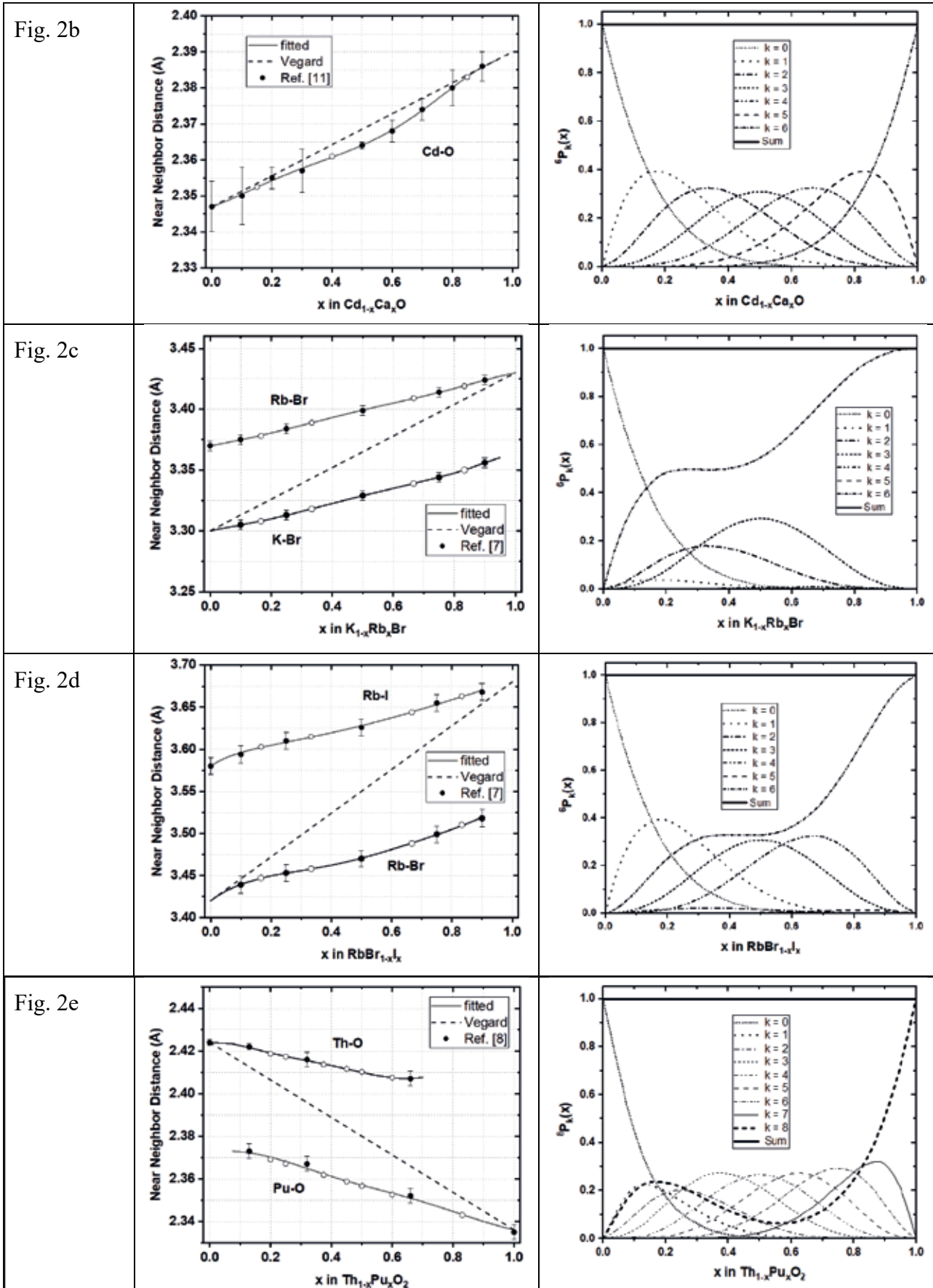
Table 2 The Statistical Strained Model (SSM) data for the ternary Fluorite alloy.

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	
Configuration	0A,8B T_Z^8	1A,7B T_Z^8	2A,6B T_Z^8	3A,7B T_Z^8	4A,4B T_Z^8	5A,3B T_Z^8	6A,2B T_Z^8	7A,1B T_Z^8	8A,0B T_Z^8	Comment
Th _{1-x} Pu _x O ₂ [8]										Fig. 2e
W _k		3.885	2.006	1.005	1.008	1.013	1.014	1.025		Residue = 1 E-5
C _k		0.588	0.665	0.997	0.992	0.979	0.957	0.828		C _{Mean} = 0.84
R _{1,PuO} (Å)		2.575	2.466	2.347	2.361	2.358	2.350	2.342	2.336	
R _{1,ThO} (Å)	2.424	2.427	2.401	2.426	2.411	2.370	2.449	2.398		
Each T _k ⁸ (%)	11.1	6.5	7.4	11.1	11.1	10.9	10.6	9.2	22.2	100 %
Binary (%)	11.1								22.2	33 %
Th _{1-x} U _x O ₂ [8]										Fig. 2f
W _k		3.932	2.008	1.002	0.998	0.999	0.999	0.999		Residue = 4 E-5
C _k		0.581	0.664	0.999	0.998	0.999	0.999	0.999		C _{Mean} = 0.85
R _{1,UO} (Å)		2.570	2.400	2.380	2.380	2.380	2.370	2.370	2.37	
R _{1,ThO} (Å)	2.424	2.417	2.420	2.420	2.410	2.410	2.400	2.410		
Each T _k ⁸ (%)	11.2	6.5	7.4	11.1	11.1	11.1	11.1	11.1	19.5	100 %
Binary (%)	11.2								19.5	31 %
Th _x Na _{1-x} F ₄ [12,13]										Fig. 2g
W _k		1.123	2.059	1.703	1.208	0.131	1.003	1.004		Residue = 2 E-9
C _k		0.982	0.647	0.578	0.792	0.131	0.992	0.970		C _{Mean} = 0.69
R _{1,ThF} (Å)	2.26	2.277	2.270	2.363	2.220	3.828	2.472	2.325		
Each T _k ⁸ (%)	20.8	10.9	7.2	6.4	8.8	1.5	11.0	10.8	22.7	100 %
Binary (%)	21								23	43 %

Table 3 Experimental single configurations data of the two ternary alloys A_{1-x}B_xZ.

Alloy	Group		R _{1,BZ}	R _{1,AZ}	W _k = C _k	1A,5B T_Z^6
Zn _{1-x} Mg _x O [14]	II-VI	x _{Mg} from 0.06 to 0.19	R _{1,MgO} ≈ 2.12	R _{1,Zn} ≈ 2.16	≈ 0.05	≈ 0 %
Ce _{1-x} Cu _x O ₂ [15]	I-IV	x _{Cu} from 0 to 0.1	R _{1,CuO} ≈ 1.96		≈ 0.05	≈ 0 %





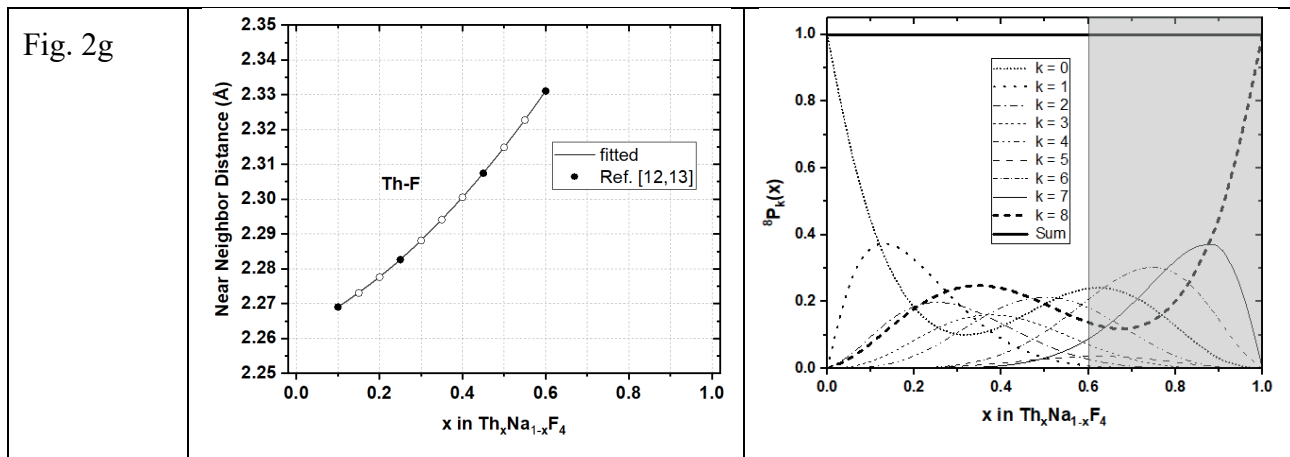


Figure 4. Fig. 2: Radius ($R_{1,AZ}$ and $R_{1,BZ}$) and configuration probabilities (kP_k) of the investigated ternary alloys $A_{1-x}B_xZ$ structure B1 and C1. The following graphical convention is used: literature data (radius) are shown as full circles with the error bars; additional extrapolated interpolated data-points are shown as open circles; Vegard line (dashed line).

Conclusions

The proposed approach to estimate the Site Occupation Preferences (SOPs) of solid solutions of structured ternary alloys uses additional interpolated data along with the available ones when the experimental data set does not cover the entire doping range of the sample investigated. In this approach, it was assumed that the interatomic distances in the sample undergo a continuous change during doping, a condition that may be fulfilled only in a solid solution where no phase transitions nor phase separations occur.

The proposed model was applied to four rock salt and three fluorite structures having different numbers of first neighbors. Based on the samples analysed and the results obtained, it was confirmed that ternary alloys are mainly characterized by extreme preferences, in which multinary configurations are depressed. In addition, results obtained indicate a deviation from the ideal Bernoulli random distribution, and the available dataset does not allow the identification of the electronic structure leading to extreme preferences. In this regard, many questions remain open and merit further research to understand why significant preferences occur in these and in many other alloys.

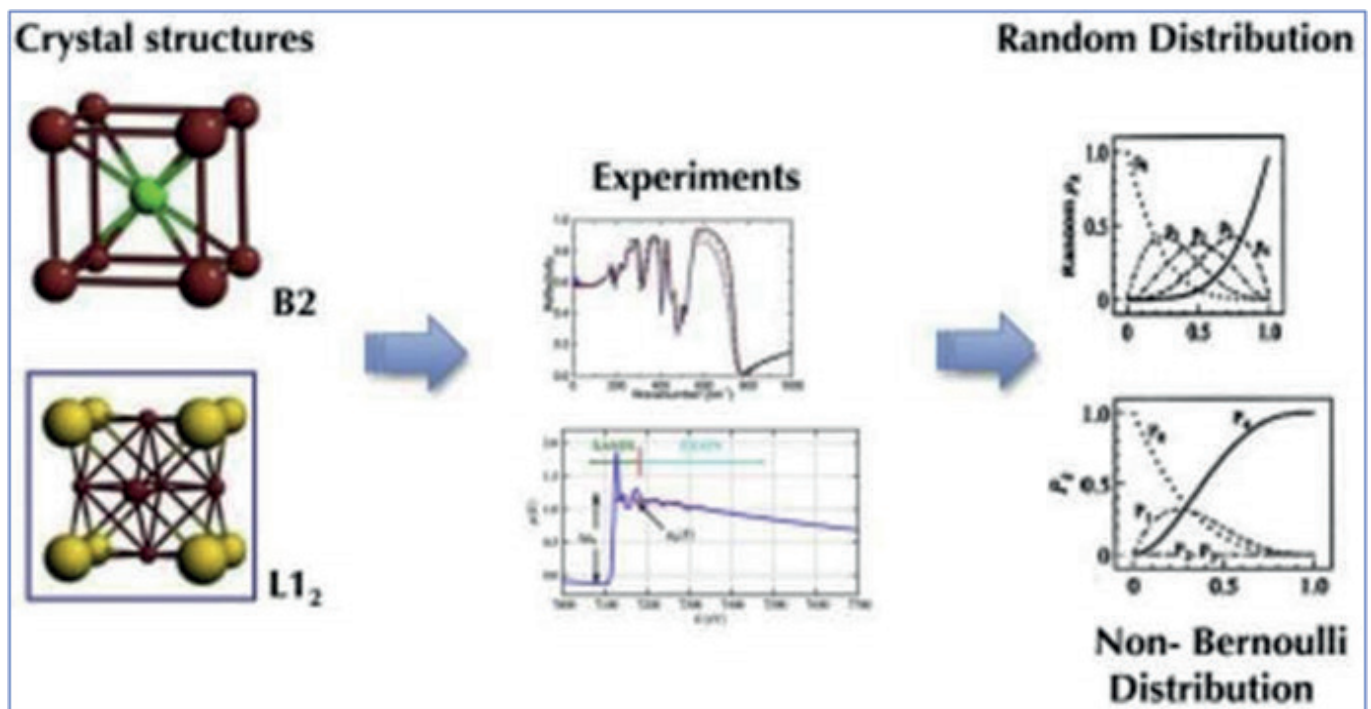
References

1. B.V. Robouch, A. Kisiel, J. Konior, Statistical model for site occupation preferences and shapes of elemental tetrahedra in the zinc-blende type semiconductors GaInAs, GaAsP, ZnCdTe, *J Alloys Compd.* 339 (2002) 1-17. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(01\)01973-9](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(01)01973-9)
2. B.V. Robouch, et al., Statistical model analysis of local structure of quaternary sphalerite crystals, *Low Temp. Phys.* 33 (2007) 214-225. <https://doi.org/10.1063/1.2719958>.
3. B.V. Robouch, et al., Analysis of the phonon line profile of hydrogenated CdTe, *J. Phys.: Condens. Matter.* 20 (2008) 325217-3252126. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/32/325217>
4. B.V. Robouch, et al., Local structure analysis of Ga[1 - x]Al[x]N epitaxial layer, *J. Appl. Phys.* 104 (2008) 073508-4. <https://doi.org/10.1063/1.2987477>
5. B.V. Robouch, et al., Strained-tetrahedra statistical model for atomic distances and site occupations in ternary intermetallic M3(X X') structures Ni3(AlFe) case, *J Alloys Compd.* 359 (2003) 73-78. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(03\)00210-X](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(03)00210-X)
6. B.V. Robouch, A. Marcelli A., Statistical model structure of A(1 - x)Z(x)B(2) Laves phase C15 system---the superconducting alloy Ce(1-x)La(x)Ru(2). *Low Temp. Phys.* 35 (2009) 116-121. <https://doi.org/10.1063/1.3064918>
7. J.B. Boyce, J.C. Mikkelsen, Local structure of ionic solid solutions: Extended x-ray-absorption fine-structure study, *Phys. Rev. B.* 31 (1985) 6903-6905. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.6903>
8. S. Hubert, et al., Local Structure of Actinide Dioxide Solid Solutions Th_{1-x}U_xO₂ and Th_{1-x}Pu_xO₂, *Inorg. Chem.* 45 (2006) 3887-3894. <https://doi.org/10.1021/ic050888y>
9. A. Kisiel, B.V. Robouch, A. Marcelli, Local crystalline structure of multinary semiconducting alloys: Random vs. ordered distributions, *Opto-Electronics Rev.* 25 (2017) 242-250. <https://doi.org/10.1016/j.opelre.2017.06.012>

10. A. Kuzmin, et al., X-ray absorption spectroscopy study of NiMg_{1-x}O solid solutions on the Ni K edge, J. Phys. Condens. Matter. 7 (1995) 9357-9368. <http://www.dragon.lv/oxidephys/papers/ak31.pdf>, accessed on 22/02/2023
11. V. Srihari, et al., Local structural studies of the cubic Cd_{1-x}CxO system through Cd K edge extended X-ray absorption spectroscopic studies, J. Synchrotron Radiat. 19 (2012) 541-546. <https://doi.org/10.1107/S0909049512018419>
12. C. Bessada, et al., Investigation of ionic local structure in molten salt fast reactor LiF-ThF₄-UF₄ fuel by EXAFS experiments and molecular dynamics simulations. J. Mol. Liq. 307 (2020) 112927. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.112927>
13. M. Numakura, et al., Structural investigation of thorium in molten lithium, calcium fluoride mixtures for salt treatment process in molten salt reactor, Prog. Nucl. Energy. 53 (2011) 994-998. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2011.04.026>
14. M. Li, et al., EXAFS and SR-XRD study on Mn occupations in Zn_{1-x}MnxO diluted magnetic semiconductors, NIM-B. 269 (2011) 2610-2613. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2011.07.094>
15. P. Bera, et al., Structural Investigation of Combustion Synthesized Cu/CeO₂ Catalysts by EXAFS and Other Physical Techniques: Formation of a Ce_{1-x}CuxO_{2-δ} Solid Solution, Chem. Mat. 14 (2002) 3591-3601. <https://doi.org/10.1021/cm0201706>

Highlights

- A method to obtain SOPs of alloys is proposed when experimental data is missing.
- The method was applied and discussed for several B1 and C1 ternary alloys.
- This work indicates deviations from the ideal random Bernoulli distribution.



Upcoming conferences

Edyta Piskorska-Hommel

Institute of Low Temperature and Structure Research Polish Academy of Sciences

1. School on Synchrotron Light Sources and Their Applications

15 Jan 2024 - 26 Jan 2024

• Online, Any Location (virtual event)

Organizer: Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italy

2. SUM2024 — 18th SOLEIL Users' Meeting 2024 at SOLEIL

18 Jan 2024 - 19 Jan 2024

• Saint-Aubin, France

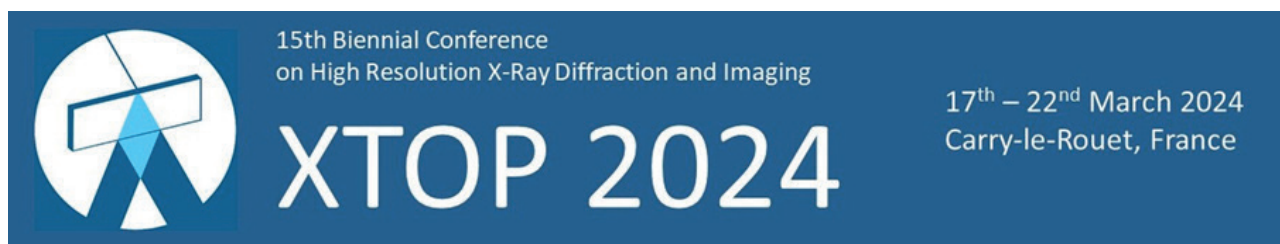
<https://www.synchrotron-soleil.fr/fr/evenements/sum2024-0>

3. XTOP 2024 — 15th Biennial Conference on High Resolution X-ray Diffraction and Imaging

17 Mar 2024 - 22 Mar 2024

• Carry-le-Rouet, France

<https://xtop2024.sciencesconf.org/>



4. ECS9 — 9th European Crystallographic School

24 Jun 2024 - 30 Jun 2024

• Nancy, France

<https://ecs-9.event.univ-lorraine.fr/>



5. SXNS17 — International Surface X-ray and Neutron Scattering Conference

15 Jul 2024 - 18 Jul 2024

• Grenoble, France

<https://www.sas2024.tw/site/page.aspx?pid=553&sid=1535&lang=en>



6. XRM 2024 — The 16th International Conference on X-ray Microscopy (XRM)

12 - 16 Aug 2024

• Lund, Sweden

<https://www.xrm2024.com/>

7. ECM MEETING 2024 — 34th European Crystallographic Meeting

26 - 31 Aug 2024

• Padova, Italy

<https://www.ecm34.org/>

8. 15th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (SRI)

6 - 30 Aug 2024

• Hamburg, Germany

Registration opens: Spring 2024

Early-bird deadline: May 2024

Registration deadline: June 2024

https://www.sri2024.eu/about_sri/



Wspomnienie o prof. Jacku Szade

Jerzy Kubacki

Uniwersytet Śląski w Katowicach

W samym środku pierwszego marcowego tygodnia otrzymałem smutną wiadomość. Choć każdy zdawał sobie sprawę z ogromu sił, które w walkę z chorobą nowotworową wkładał Profesor Jacek Szade, wszyscy wierzyliśmy w jej pokonanie. Profesor utwierdzał nas w tym przekonaniu – prowadzone z nim rozmowy podczas prowadzenia wspólnych pomiarów w Laboratorium Fizyki Powierzchni na Uniwersytecie Śląskim wskazywały na jego optymistyczne podejście do toczącej się w organizmie walki i zarazem próbą jej dogłębnego zrozumienia. Ogromna ilość wiedzy z zakresu biologii molekularnej i obrazowania medycznego, którą starał się nam przekazać podczas tych rozmów, wskazywała na to, że traktował swoją chorobę w kategorii zrozumienia naukowego – lecz tym razem z wyraźnie wytyczonymi granicami. Znając Jacka Szade jako człowieka, który nigdy nie starał się działać powierzchownie - każde zagadnienie, każdą rolę jaką miał do spełnienia wypełniał sięgając do głębi problemu, trudno jest nam wyrazić głębię naszego bólu i przygnębienia po utracie wspaniałego Kolegi i zarazem wszechstronnego Naukowca.

Jacek Szade do wszystkich nas podchodził z ogromną życzliwością i koleżeństwem.

Swoją karierę naukową, już od czasów studenckich związał z Uniwersytetem Śląskim, na którym zdobył tytuł magistra, obronił pracę doktorską i uzyskał tytuł Profesora. Na każdym etapie rozwoju zawodowego mógł liczyć na pomoc ówczesnego Kierownika Katedry Fizyki Ciała Stałego, profesora Augusta Chełkowskiego. Sposób kierowania Katedrą przez Profesora Augusta Chełkowskiego w żaden sposób nie ograniczał swobodnego rozwoju zawodowego i poszerzania horyzontów naukowych naszego Kolegi, dla które

go pamięć o swoim nauczycielu była często przez niego podkreślana podczas licznych spotkań i sympozjów naukowych. W mojej pamięci szczególnie utkwiły mi dwa symboliczne odniesienia i przywołania osoby profesora Augusta Chełkowskiego. Pierwsze, związane z początkiem samodzielnej kariery naukowej jako dedykacja pracy habilitacyjnej pamięci Prof. Augusta Chełkowskiego w roku 2001 i drugie w czasie prelekcji na temat specyfiki myślenia w fizyce u Einsteina i Chełkowskiego podczas sympozjum w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Śląskiego poświęcone pamięci Augusta Chełkowskiego w roku 2017.

Jacek aktywnie uczestniczył w życiu środowiska akademickiego Uniwersytetu Śląskiego. Działając w organizacji związkowej „Solidarność” zajmował się wieloma sprawami, ale szczególnie był ukierunkowany na poprawę warunków płacowych pracowników Uczelni.

Dużą część swojego czasu poświęcał koleżeńskiej pomocy przy rozwiązywaniu niezliczonych problemów związanych z prowadzeniem badań naukowych i pomiarów własności magnetycznych i elektrycznych związków międzymetalicznych, którymi zajmował się wraz ze swoimi kolegami ówczesnej Katedry Fizyki Ciała Stałego w latach dziewięćdziesiątych. Szczególną rolę odgrywały tutaj jego nieprzeciętne zdolności manualne i techniczne, które wykorzystywał przy projektowaniu i zarazem korygowaniu powstałych problemów w układach służących do pomiarów oporu elektrycznego i podatności magnetycznej.

Nawiązanie współpracy w połowie lat 90 przez prof. Augusta Chełkowskiego z Uniwersytetem Osnabrueck w Niemczech i dużej pomocy profesora Manfreda Neumanna umożliwiło pozyskanie funduszy na zakup nowoczesnego spektrometru elektronów, w skład którego wchodziło szereg technik powierzchniowo czułych takich jak spektroskopia elektronów wzbudzanych promieniowaniem rentgenowskim i ultrafioletowym XPS i UPS, spektroskopia elektronów Augera AES, mikroskopia elektronów wtórnych SEM oraz spektroskopia masowa jonów wtórnych SIMS. Profesor Jacek Szade wspólnie z dr Antonim Winiarskim realizował wtedy zawarcie kontraktu na dostawę i uruchomienie nowego spektrometru.

Pojawienie się nowych możliwości badawczych skierowały zainteresowania Jacka Szade w stronę fizyki powierzchni, a szczególnie w stronę zagadnień związanych z badaniami struktury elektronowej materii. Prowadzona przez niego współpraca naukowa z grupą badawczą profesora Manfreda Neumanna z Uniwersytetu w Osnabrueck miała udział w głębszej analizie struktury powierzchni przez naszego Kolegę w oparciu o obliczenia teoretyczne struktury elektronowej. Dodatkowo nawiązana współpraca z Centrum Badawczym Juelich w Niemczech szybko zaowocowała wieloma wspólnymi projektami i publikacjami, dzięki którym profesor Jacek Szade stał się ekspertem w badaniach struktury elektronowej.

W prowadzeniu badań Jacek Szade nie ograniczał się tylko do użytkowania standardowych spektrometrów fotoemisyjnych. W centrum jego zainteresowań było także wykorzystanie promieniowania synchrotronowego do analizy struktury elektronowej. Swoje projekty badawcze realizował w ośrodkach naukowych na liniach badawczych synchrotronu Elettra we Włoszech i Maxlab w Szwecji.

W roku 2009 dokonał rozbudowy istniejącego Laboratorium Fizyki Powierzchni na Uniwersytecie Śląskim o nowe techniki pomiarowe, tj. mikroskopia z sondą skanującą SPM, dyfraktometr wolnych elektronów LEED oraz napylarkę do produkcji cienkich warstw MBE. Nowe techniki wytwarzania i analizy próbek cienkowarstwowych pozwoliły na rozszerzenie prowadzonych przez Profesora badań w oparciu o analizę topograficzną uzyskiwanych materiałów połączoną z możliwością określenia ich lokalnych własności elektrycznych w oparciu o pomiary lokalnego przewodnictwa LC-AFM i prądu tunelowego STM.

Od roku 2002 aktywnie działał w strukturach Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego. Dwukrotnie piastował stanowisko wiceprezesa zarządu Towarzystwa. Wspólnie z profesorem Andrzejem Burianem zorganizował w 2009 roku jedno z cyklicznych sympozjów PTPS w Podlesicach w Jurze Krakowsko-Częstochowskiej. Drugie organizowane pod jego kierownictwem sympozjum odbyło się w nowym kampusie Uniwersytetu Śląskiego w Chorzowie w 2015 roku. Organizacja spotkań była sposobem na propagowanie wiedzy na temat sposobów wykorzystania promieniowania synchrotronowego w szerokim zakresie nauki począwszy od geologii a na medycynie skończywszy. Wspólnie z kolegami PTPS jest autorem książki wydanej przez Towarzystwo: „Promieniowanie synchrotronowe w spektroskopii i badaniach strukturalnych”, rozdział: Efekty stanu końcowego w fotoemisji rezonansowej, Warszawa, Kraków 2011.

Ze strony Polskiego Towarzystwa Promieniowania Synchrotronowego PTPS aktywnie uczestniczył

w projekcie budowy polskiego Synchrotronu „Solaris”. W roku 2016 uzyskał finansowanie na realizację zaprojektowanej przez siebie linii badawczej PHELIX, umożliwiającej prowadzenie badań struktury elektronowej materiałów metodami fotoemisji rezonansowej w połączeniu z pomiarami absorpcji rentgenowskiej i detekcją stanów spinowo-rozdzielczych.

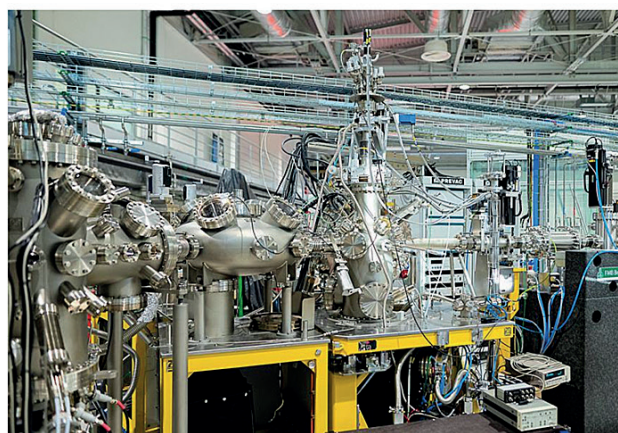
W swojej pracy dydaktycznej stale rozbudzał ciekawość naukową wśród studentów i ukierunkowywał ich zainteresowania badawcze. Nigdy nie działał pobieżnie, każdym zagadnieniem zajmował się bardzo dogłębnie. Wynikiem uczciwego podchodzenia do każdego tematu związanego z fizyką ciała stałego było duże zainteresowanie dla prowadzonych przez niego badań ze strony przyszłych magistrantów i doktorantów.

Na wyjazdach konferencyjnych podczas przerw między poszczególnymi sesjami zabierał nas na górskie wycieczki w doliny tatrzańskie czy pasma Beskidu Śląskiego. Szczególnie utkwiła mi w pamięci wycieczka do nieczynnego już obecnie schroniska Orłowa w okolicach Ustronia podczas konferencji ISSRNS w roku 2000 w o.w. Gwarek w Ustroniu. Od tej chwili Jacek zawsze towarzyszy mi na drodze prowadzącej przez Palenicę na szczyt Orłowej, skąd roztacza się widok doliną Wisły.

Mimo że odszedł już na zawsze, pozostawił Nas jako swoich wychowanków i następców prowadzonych przez niego badań naukowych. Dzięki zaprojektowanej przez niego linii badawczej PHELIX na synchrotronie Solaris, możliwy jest dalszy rozwój zainteresowań i poszerzanie naszych horyzontów naukowych.



Fotografia 1. Grupa wychowanków Profesora Jacka Szade podczas Sympozjum IX KSUPS 2015 w Chorzowie.



Fotografia 2. Stacja końcowa linii badawczej PHELIX na synchrotronie „SOLARIS” w Krakowie.

Award of the PSRS

Edyta Piskorska-Hommel

Institute of Low Temperature and Structure Research Polish Academy of Sciences

On June 26, 2023, at the SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre, diplomas were awarded to the winners of the PSRS Award for 2022. The ceremony took place during the meeting of the board of the Polish Synchrotron Radiation Society.

The Chapter decided to award the PTPS Prize to the following laureates:

Category I: for the doctoral dissertation:

Dr. Katarzyna Małgorzata Kosyl for her dissertation:

"Structure and Disorder in Rare Earth Borates $\text{Ca}_3\text{RE}_2(\text{BO}_3)_4$: Diffraction Studies under Ambient Conditions and as a Function of Temperature".

Category II: for scientific publication, to the team of authors:

Joanna I. Loch, Barbara Imiołczyk, Joanna Śliwiak, Anna Wantuch, Magdalena Bejger, Mirosław Gilski and Mariusz Jaskólski, for the article :
"Crystal structures of the elusive *Rhizobium etli* L-asparaginase reveal a peculiar active site." published in Nature Communications (2021)12:6717.
DOI: 10.1038/s41467-021-27105-x

Category III: for a popularising work related to synchrotron radiation or for other activities for the development of the Polish synchrotron environment,

Prof. Dr. Wojciech Paszkowicz, for his initiative and long-standing editorial work on the PTPS Newsletter Synchrotron Radiation In Natural Science and on the PTPS post-conference materials, as well as for his activity related to the dissemination of knowledge on synchrotron research, including his involvement in the preparation of a script and a book on synchrotron techniques.



Photo 1. In the photo from the left: Prof. Eng. Marcin Sikora, Prof. Eng. Ryszard Sobierajski, Prof. Eng. Agnieszka Witkowska, Prof. Wojciech Kwiatek, Prof. Wojciech Paszkowicz, Dr. Joanna Loch, Dr. Edyta Piskorska-Hommel, Dr. Marcin Klepka. Photo: J. Kowalik

The Polish Synchrotron Radiation Society Prize Committee composed of:

Dr. Eng. Joanna Czapla-Masztafiak, Dr. Maciej Jankowski, Prof. Zbigniew Kaszukur, Dr. Marcin Klepka, Dr. Edyta Piskorska-Hommel, Prof. Paweł Piszora, Prof. Eng. Agnieszka Witkowska, Dr. Eng. Anna Wolska.

SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre

Agnieszka Cudek

SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre

It seemed to us that after more than two years of the COVID pandemic, the situation in the world would return to relative normality. Unfortunately, the war in Ukraine caused by Russia has shown how fragile the foundations of the world order are, and the conflict taking place at the gates of Europe also has a multifaceted impact on the world of science.

Fixed points in a changing environment

In 2022, the SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre, despite many difficulties and threats related also to the instability of the energy market, invariably continued the implementation of its goals. Working with the national and international scientific community, it designed, created and made available research stations using unique experimental methods based on the properties of synchrotron radiation and Cryo-EM techniques.



Photo 1. SOLARIS Centre team in front of the building, May 2022. Photo: J. Kowalik

A constant feature of the existence of the Centre as a young entity is its development. Despite the dynamics of changes taking place in 2022, both in terms of global politics and their impact on the scientific community, the trends toward evolution have been maintained. In the scale of the entire unit, an undisputed milestone this year was the start of the expansion of the synchrotron experimental hall. The enlarged building will primarily enable the launch of four more beamlines, including SOLCRYSS, intended for structural experiments, which is already in the advanced design phase. The SOLCRYSS beamline will enable e.g. analysis of the structure of proteins, viruses, nucleic acids, and polymers. Cryo-EM laboratory will also find its place in the new hall. So far, two electron microscopes - Titan Krios and Glacios - are located in laboratories built especially for this purpose, in the loading dock of the old part of the building. In the enlarged hall, a Cryo-EM laboratory will be built, which will ultimately accommodate as many as four microscopes. The project also includes a sample preparation laboratory that will be available to all SOLARIS users. It will contain the necessary equipment for the preparation of samples for testing lines, as well as for the development of grids for Cryo-EM measurements. The last area that will find its place in the expanded hall is the workshop space and new offices for the increasing number of SOLARIS research team.

Also, the research infrastructure in the existing hall was subject to modification, both in the context of measuring instruments and communication. Conceptual work lasted for many months, crowned with a systemic change of the names of a number of beamlines. The common core of the new acronyms was the world science-fiction literature, thus paying homage to the work of Stanisław Lem, a kind of "godfather" of SOLARIS. Thus, the XAS beamline became PIRX, SOLABS became ASTRA, SOLAIR became CIRI, and UARPES became URANOS.



Photo 2. SOLARIS hall construction site. Photo: K. Adamczyk.

The most important thing, however, is the fact that on each of the newly built beamlines, work related to tenders or assembly of individual elements was underway. Particularly noteworthy this year was the ASTRA beamline, where in January 2022 the beginning of the start-up phase and research work with the first group of potential users took place. The former SOLABS was submitted for the spring call for applications for beamtime, and on June 30 the beamline was officially opened. The ceremony was attended by representatives of the world of science and industry, including the Consul General of Germany and representatives of the international team involved in the creation of ASTRA.



Photo 3. ASTRA beamline opening ceremony. Photo: A. Cudek.

The POLYX beamline under construction was also successful this year. In May, after passing radiological tests of the beamline, it was possible to capture a beam of X-rays that hit a fluorescent screen and caused a strong emission of synchrotron light. A milestone in the construction of CIRI (formerly SOLAIR) was the availability of the FT-IR microscope for test measurements, which in July was supplemented with the last element, the Focal Plane Array detector. Ultimately, the microscope, after being connected to the synchrotron beam, will be one of the two terminal stations of the CIRI beamline.

Users and calls for proposals

The year 2022 was a special time. At the end of the COVID pandemic, the restrictions left their mark on the travel possibilities of the scientific community. The war going on in the neighbourhood, which held our breath in this part of Europe for many months, but also the schedule for the expansion of the new synchrotron hall. All this does little to contribute to the call for proposals. In 2022, there was only one competition for beamtime - spring. The schedule of construction works made it impossible to announce the autumn recruitment. The International Evaluation Committee had the opportunity to analyze a record number of applications submitted for five beamlines and a Cryo-EM. In the ninth call for proposals for beamtime on the SOLARIS infrastructure, 114 applications were submitted, which is a significant increase in the number of research groups interested in measurements compared to the previous call, by as much as 67%. For the first time, the ASTRA beamline, dedicated to X-ray absorption spectroscopy (XAS), was made available in the competition procedure. 19 applications were submitted for research time on this beamline. The PIRX, URANOS, PHELIX, DEMETER, and Cryo-EM were the subject of 18, 15, 12, 20, and 30 applications, respectively. The autumn call for proposals took place exclusively through the CERIC-ERIC platform.

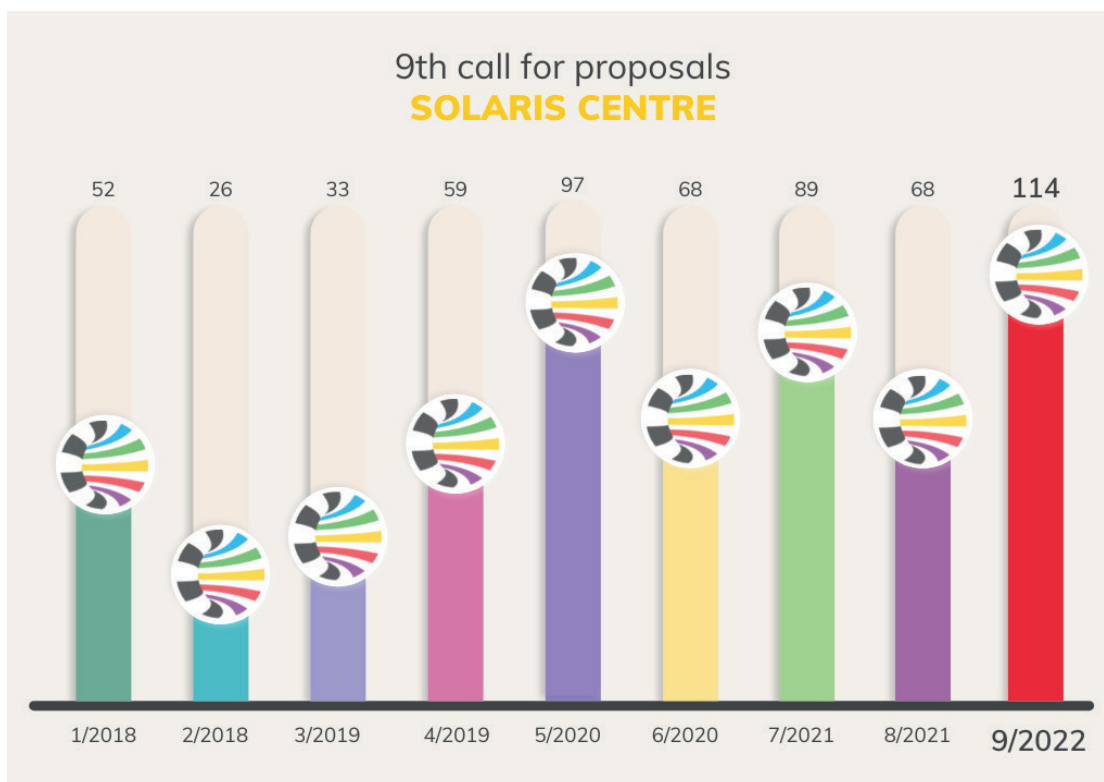


Figure 1. 9th call for proposals in SOLARIS Centre.

The highest goal - scientific publications

Increased interest in research at the Centre and better recognition of SOLARIS among researchers in the country and abroad translated into a large number of applications for research time and an increase in the number of scientific publications on research that was carried out at the synchrotron. Among the nearly fifty new publications, the article on Cryo-EM research, published in the journal entitled "EMBO Molecular Medicine", in which researchers showed how genetic mutations in patients affect Elongator activity and lead to severe clinical symptoms. In the magazine entitled "2D Materials", users of the SOLARIS Centre emphasized in 2022 the critical importance of disorder in the $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ self-assembled magnetic topological insulator, a material that is a new platform for the anomalous quantum Hall effect. This is important because this material has recently aroused the interest of scientists also due to the possibility of realizing the state of an axion insulator. Much of the research needed for this publication was carried out using the URANOS beamline. The SOLARIS scientific team also worked on interesting research, as a result of which the names of our scientists appeared in over twenty publica-

tions, often in prestigious journals. Groundbreaking research allowing the creation of three-dimensional maps of the orientation of bonds in a sample has been published by the research team at the CIRI beamline in the prestigious journal *JACS*. Summaries of selected publications are available in a dedicated "research" tab on the Centre's website.

Scientific conferences and popularization

The same factors that affected the call for proposals for beamtime processes also affected any special events planned for 2022. Nevertheless, the SOLARIS Centre constantly undertook to organize new projects in the context of popularizing not only the synchrotron and Cryo-EM but also, more broadly, exact sciences. These include the organization of scientific and popular science events, guided tours, activities in the field of media relations, campaigns in new media, establishing permanent forms of cooperation with other units, as well as activities ensuring access to information for people with disabilities. SOLARIS has been involved in 15 special events of various sizes. Among them were two scientific conferences (*International Beam Instrumentation Conference 2022* and *Joint Meeting of Polish Synchrotron Radiation Society and SOLARIS Centre Users*), a series of one-day meetings dedicated to representatives of the world of industry entitled *SOLARIS Industry Day*, seminars on innovative IT solutions, workshops for young people, experimental shows for children, meetings summarizing international projects and guest appearances by scientists from other Centres.

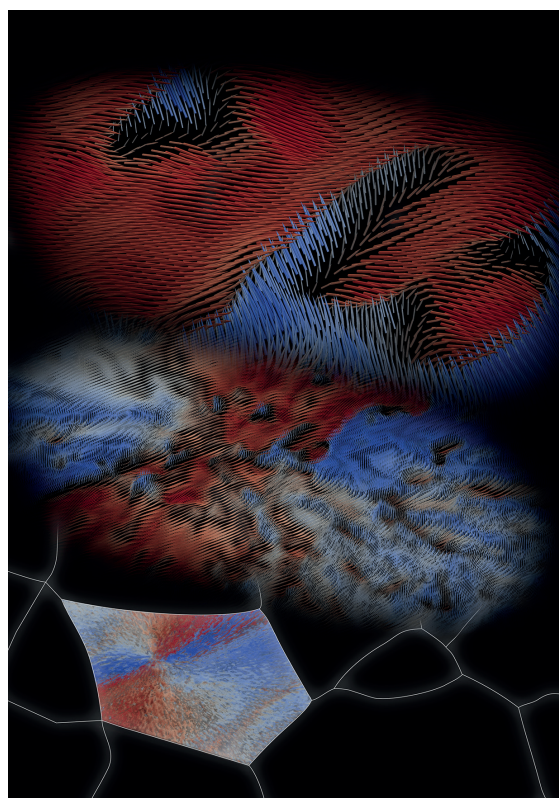


Figure 2. P. Koziół, K. Kosowska, D. Liberda, F. Borondics, and T. P. Wrobel, Super-Resolved 3D Mapping of Molecular Orientation Using Vibrational Techniques, *J Am Chem Soc* 144, 14278 (2022). doi:10.1021/jacs.2c05306. Cover of the publication design by J. Kowalik.



Photo 4. Participants at the IBIC 2022 conference in front of the Auditorium Maximum building. Photo: J. Ludwin.

As part of the initiatives addressed to the general public, a group of nearly 700 people gathered around the topic of SOLARIS, who took part in various events, such as Polish Science Day, Education Quality Week, Stanisław Lem's birthday anniversary, Małopolska Innovation Week and Researchers' Night. Among the basic activities of the Centre was the organization of trips, the participants of which were both representatives of the world of science and people (including young people) not associated with the academic environment. In this

respect, 2022 was the time when the Centre's infrastructure was visited by more people in twelve months than before the outbreak of the pandemic - 1,766 visitors were admitted, the vast majority of them before the expansion of the hall began. The last year saw a significant increase in the popularity of social media channels managed by the SOLARIS Centre. The total number of followers of SOLARIS social media channels in December 2022 included 3,035 followers, which is an increase of 56% of followers compared to the previous year. Care for maintaining constant communication with the recipients of articles on research and events carried out in SOLARIS takes place not only on the level of new media. The language of the scales is relations with journalists of traditional channels, such as radio, television, and magazines. In 2022, SOLARIS was the subject of 45 press reports.



Photo 4. Wiktor Niedzicki during the recording of the material on SOLARIS Centre. Photo: A. Cudek.

An outstanding culmination of 2022 was the plenary meeting of the LEAPS consortium. SOLARIS staff representation attended the plenary meeting of The League of European Accelerator-based Photon Sources held in Villigen, Switzerland. The main discussions focused on the vision of modern accelerator-based light sources responding to today's challenges of the energy crisis. During the deliberations, SOLARIS was chosen to lead communication with the Ukrainian scientific community in its efforts to build a synchrotron after the war. This meeting launched the ongoing multi-faceted project entitled Light for Ukraine from the beginning of 2023.

Wybory do Władz Towarzystwa

Wojciech Kwiatek

Institute of Nuclear Physics Polish Academy of Sciences

Z przyjemnością informuję, że w listopadzie odbyły się wybory do Władz Towarzystwa w związku z zakończeniem kadencji 2020-2023, w wyniku których prezesem na czteroletnią kadencję 2024-2027 została dr hab. inż. Agnieszka Witkowska. Bardzo serdecznie gratuluję dotychczasowej wiceprezes wspaniałego wyboru. Mocno wierzę, że działania Towarzystwa pod przewodnictwem kol. Witkowskiej zostaną zintensyfikowane w kierunku zacieśnienia współpracy z Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego w Krakowie. Organizacja wspólnych przedsięwzięć pozwoli na lepsze wykorzystanie tej wspaniałej infrastruktury jaką jest synchrotron SOLARIS dzięki upowszechnianiu nauki w zakresie



wykorzystania technik synchrotronowych w Polsce.

W wyniku wyborów nastąpiła też zmiana Zarządu Towarzystwa, do którego weszli: prof. dr hab. Paweł Korecki oraz dr hab. Anna Wolska. Serdecznie gratuluję i cieszę się na współpracy. Tym samym pragnę bardzo serdecznie podziękować za dotychczasową pracę w Zarządzie dr hab. Jakubowi Szlachetko i dr Zuzannie Pietralik-Molińskiej. To dzięki nim powstała nowa szata tego biuletynu. Życzę, aby nowe zadania jakie stanęły przed kol. Szlachetko i kol. Pietralik-Molińską pozwoliły na dalszą jakże owocną współpracę.

Cieszę się, że mogę przekazać stery Towarzystwa z dniem 1 stycznia 2024 w nowe ręce. Powodzenia!

Table of Contents

Dear Readers	3
Editorial board	3
Light for Ukraine – synchrotron online workshop at SOLARIS	4
Europejski Rentgenowski Laser na Swobodnych Elektronach – nowe perspektywy dla przełomowych badań rentgenowskich	5
Polish contribution to the European Synchrotron Radiation Facility	8
Estimation of Ternary Rock salt and Fluorite Structured Alloys with Site Occupation Preferences	10
Upcoming conferences	18
Wspomnienie o prof. Jacku Szade	19
Award of the PSRS	21
SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre	22
Wybory do Władz Towarzystwa	27



polish synchrotron
radiation society

Polish Synchrotron Radiation Society Board

The term of office: 2020 – 2023

Chairman:
Wojciech Kwiatek

Institute of Nuclear Physics PAN
Radzikowskiego 152
31-142 Kraków
wojciech.kwiatek@ifj.edu.pl

Vice Chairman:
Jakub Szlachetko

SOLARIS National Synchrotron
Radiation Centre
Jagiellonian University
Czerwone Maki 98
30-392 Kraków
jakub.szlachetko@uj.edu.pl

Vice Chairman:
Agnieszka Witkowska

Faculty of Applied Physics and
Mathematics
Narutowicza 11/12
80-233 Gdańsk
agnieszka.witkowska@pg.edu.pl

Treasurer:
**Joanna
Czapla-Masztafiak**

Institute of Nuclear Physics PAN
ul. Radzikowskiego 152
31-142 Kraków
joanna.czapla@ifj.edu.pl

Secretary of the PSRS:
**Edyta
Piskorska-Hommel**

Institute of Low Temperature
and Structure Research PAN
Okólna 2, 50-422 Wrocław
e.piskorska@intibs.pl

Board Member:
Marcin Klepka

Institute of Physics PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warsaw
mklepka@ifpan.edu.pl

Board Member:
Maciej Kozak

Faculty of Physics
Adam Mickiewicz University
Uniwersytetu Poznańskiego 2
61-614 Poznań
mkozak@amu.edu.pl

Board Member:
**Zuzanna
Pietralik-Molińska**

Faculty of Physics
Adam Mickiewicz University
Uniwersytetu Poznańskiego 2
61-614 Poznań
zuzannap@amu.edu.pl

Board Member:
Marcin Sikora

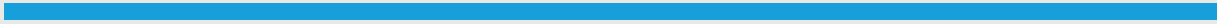
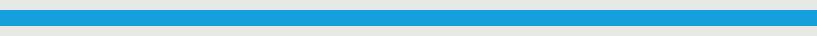
Academic Centre for Materials
and Nanotechnology AGH
al. Mickiewicza 30
30-059 Kraków
marcin.sikora@agh.edu.pl

Board Member:
Ryszard Sobierajski

Institute of Physics PAN
al. Lotników 32/46
02-668 Warsaw
ryszard.sobierajski@ifpan.edu.pl

Board Member:
Marek Stankiewicz

SOLARIS National Synchrotron
Radiation Centre
Jagiellonian University
Czerwone Maki 98
30-392 Kraków
m.j.stankiewicz@uj.edu.pl



polish synchrotron
radiation society