

Fri-elektron laseren –

Næste generation af brillante synkrotronstrålingskilder

Robert Feidenhans'l, Afdelingen for Materialers Fysik og Kemi, Forskningscenter Risø, Leif Gerward, Institut for Fysik, Danmarks Tekniske Universitet, og Janus Staun Olsen, Ørsted Laboratoriet, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet.

Indledning

Røntgenrør er blevet brugt til frembringelse af røntgenstråler siden Röntgens opdagelse af strålerne i 1895. Der er et forbløffende faktum, at til trods for den enorme betydning røntgenstråling har fået, har der kun været en ret beskedet udvikling af de konventionelle røntgenkilder med hensyn til brillans (se box 1). De vigtigste fornyelser har været røntgenrøret, som vi kender det i dag, med wolframglødetråd, opfundet af William Coolidge i 1913, samt røntgenrøret med roterende anode, introduceret af R. E. Clark i 1934. En skelsættende opdagelse fandt sted i 1947, idet Elder, Gurewitsch, Langmuir og Pollock for første gang iagttog synkrotronstråling i form af synligt lys fra en 70 MeV elektronsynkrotron tilhørende det amerikanske firma General Electric.

I store partikelacceleratorer, såsom betatroner og elektronsynkrotroner, bringes elektroner op til meget høje energier af størrelsesorden GeV, svarende til hastigheder nær lysets. Ved hjælp af et magnetfelt tvinges elektronerne til at bevæge sig i en cirkulær bane. På grund af centripetalaccelerationen udsender elektronerne derved elektromagnetisk stråling, hvis spektrum strækker sig fra synligt lys til hård røntgenstråling. Synkrotronstrålingen udsendes i et intenst og velkollimeret strålebundt langs partikelbanens øjeblikkelige retning. Endvidere er synkrotronstrålingen lineært polariseret og pulseret med en pulsvarighed på ca. 100 ps og en periodicitet på ca. 1 ms.

De første synkrotronstrålingskilder var acceleratore, der hovedsagelig var brugt af højenergi-fysikere. Senere er der bygget såkaldte lagerringe alene med henblik på at fremstille synkrotronstråling. I en lagerring kan bundter af elektroner eller positroner cirkulere rundt med fastholdt energi i op til et døgn, inden det er nødvendigt at fylde ringen med nye partikler. I moderne anlæg tvinges elektronerne ved hjælp af særlige magneter, der kaldes wiggler og undulatorer, til at løbe slalom i små buer, hvilket mangedobler strålingens intensitet. Undulatoren er den mest brillante røntgenkilde, der findes i dag. Eksempler på sådanne anlæg er Advanced Light Source (ALS) i Berkeley, Advanced Photon Source (APS) i Argonne, European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) i Grenoble og SPring-8 i Japan.

Box 1. Brillans :

En røntgenstråles kvalitet angives ved antal fotoner per sekund og per relativ båndbredde. Derudover normaliseres med strålens vinkeldivergens og strålekildens areal. Hermed når man frem til kvalitetsmålet brillans, der er defineret ved

$$\text{Brillans} = \text{fotoner}/(s \cdot mrad^2 \cdot mm^2 \cdot 0,1\% \text{ båndbredde}),$$

jf. luminans eller lystæthed, som bliver brugt i lyslæren. Det er ikke til alle eksperimenter, at brillansen er det relevante kvalitetsmål. Undertiden er det snarere "brightness", hvor man ikke normaliserer med kildearealet:

$$\text{Brightness} = \text{fotoner}/(s \cdot mrad^2 \cdot 0,1\% \text{ båndbredde}),$$

jf. lysstyrke i lyslæren. Der kan også simpelt hen være tale om fotonfluxen, hvor man heller ikke normaliserer med vinkeldivergensen:

$$\text{Fotonflux} = \text{fotoner}/(s \cdot 0,1\% \text{ båndbredde}),$$

jf. lysstrøm eller lysflux. Med anvendelse af "brightness" eller fotonflux er forskellen mellem synkrotronstrålingskilder og røntgenrør noget mindre men stadig mange størrelsesordener (jf. figur 5).

I de sidste tre årtier har anvendelse af synkrotronstråling medvirket til en rivende udvikling inden for faststoffysik, overfladefysik, materialeforskning, kystallografi, molekylærbiologi m.v. [1]. Også industrielle og medicinske anvendelser er ved at vinde indpas. For nylig er der sket store fremskridt med hensyn til at bygge elektronkilder med høje strømstødsstyrker og lav emittans, lineære elektronacceleratorer i GeV-området, samt præcisions-undulatorer, baseret på SmCo₅ og andre moderne magnetmaterialer. På grund af disse videnskabelige og teknologiske fremskridt vil det være muligt at installere en undulator i en lineær accelerator og opnå laservirkning under et enkelt gennemløb i en såkaldt fri-elektron laser. Igangværende studieprojek-

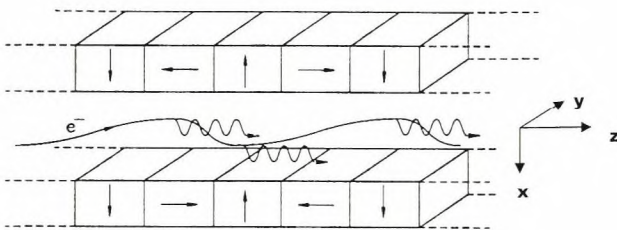
ter viser, at det skulle være muligt at opnå laservirkning også for røntgenstråling. Det er derfor højst sandsynligt, at det næste store spring med hensyn til intens synkrotronstråling vil bestå i udnyttelse af fri-elektron lasere til frembringelse af røntgenstråling med enestående brillans og kohærens.

Undulatorer

Ved afbøjningen af relativistiske elektroner eller positroner udsendes røntgenstråling tangentielt til partikelbanen i et strålebundt med meget lille vinkeldivergens. Den basale årsag hertil er Doppler-effekten, som bliver ekstrem, fordi partiklerne bevæger sig næsten lig så hurtigt som den elektromagnetiske stråling, de udsender. Man kan vise, at strålebundtets åbningsvinkel ψ er givet ved

$$\psi = \frac{1}{\gamma}, \quad (1)$$

hvor γ er den relativistiske faktor, dvs. $\gamma = m/m_0 \approx E/m_0c^2$ hvor m er elektronens relativistiske masse, og m_0 er dens hvilemasse, E er elektronenergien, og c er lyshastigheden. For en elektron findes $m_0c^2 = 0,511$ MeV, og vinkeldivergens ψ vil ifølge ligning (1) være mindre end 0,5 mrad (0,03°), når elektronenergien er større end 1 GeV.



Figur 1. Undulator eller wiggler.

Afbøjningsmagneter er de klassiske redskaber til frembringelse af synkrotronstråling, men moderne lagerringe er indrettet med retlinede stykker, hvor man indsætter undulatorer eller wiggler. Disse består som vist i figur 1 af magneter med alternerende polaritet. Det periodisk varierende statiske magnetfelt giver elektronerne en transversalt svingende bevægelse under gennemløbet, og strålingen frembringes af elektronernes transversale acceleration i undulatoren. I det følgende vil undulatorens symmetriakse benævnes z -aksen, og magnetfeltet antages at variere i x -aksens retning (se figur 1). Lad det statiske magnetfelt være givet ved

$$B_x = B_0 \sin \frac{2\pi z}{\lambda_0}, \quad (2)$$

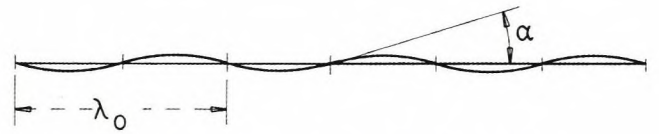
hvor B_0 er magnetfeltets amplitude, og λ_0 er undulatorperioden. Ved at løse bevægelsesligningerne for

en elektron i det periodisk varierende magnetfelt B_x kan man vise, at elektronen har en periodisk varierende hastighedskomponent v_y , og at den maksimale afbøjningsvinkel α (jf. figur 2) er

$$\alpha = \frac{eB_0\lambda_0}{2\pi\gamma m_0c}, \quad (3)$$

hvor e er elektronens ladning. Den såkaldte undulatorparameter K er defineret ved

$$K = \frac{\alpha}{\psi} = \alpha\gamma = \frac{eB_0\lambda_0}{2\pi m_0c}. \quad (4)$$



Figur 2. Elektronbevægelse i undulator eller wiggler.

For en undulator gælder, at $K \leq 1$, og at elektronens afbøjningsvinkel er af samme størrelsesorden som vinkeldivergensen for den stråling, elektronen udsender. Herved er der mulighed for konstruktiv interferens mellem stråling, der udsendes fra de forskellige buer under elektronens bevægelse igennem undulatoren. For en wiggler gælder, at $K \gg 1$ (typisk ca. 20), og der er ingen interferenseffekter.

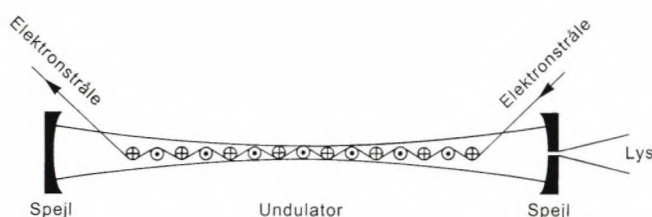
Vekselvirkningen mellem elektronerne og det elektromagnetiske strålingsfelt må beskrives med avanceret kvantemekanik [2]. Heldigvis kan undulatorens resonansbetingelse forstås ved en simpel model. Den elektromagnetiske stråling udbreder sig med lysets hastighed, medens elektronerne har en noget lavere hastighed. I den tid, det tager en elektron at gennemløbe en periode i undulatoren, skal lysbølgen have tilbagelagt undulatorperioden plus en lysbølgelængde. Elektronen har i dette tidsrum oplevet passage af en bølgefeltperiode, samtidigt som den har tilbagelagt en undulatorperiode [3]. Den lige omtalte betingelse kan formuleres

$$\frac{\lambda_0}{v_z} = \frac{\lambda_0 + \lambda}{c} \quad (5)$$

hvor v_z er elektronens hastighedskomponent i hovedbevægelsesretningen, og λ er bølgelængden for den udsendte stråling. Med anvendelse af elektronens relativistiske bevægelsesligninger og ovenstående ligning (5) kan man vise, at resonansbølgelængden λ er givet ved

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right) \quad (6)$$

Da magnetfeltet ikke har præcis sinusform i praksis, får man også højere harmoniske bidrag svarende til, at λ i ligning (6) erstattes af $n\lambda$, hvor n er et helt tal (langs undulatoraksen får man dog kun de ulige harmoniske bidrag). Resonansbølgelængden kan tunes ved variation af elektronenergien E og dermed den relativistiske faktor γ , samt af undulatorparameteren K . Sidstnævnte kan bekvemt varieres ved at ændre spalten mellem undulatomagnetterne og dermed magnetfeltet B_0 . Bemærk, at ligning (6) er et udtryk for resonans, men at der endnu ikke er tale om laservirkning.



Figur 3. Fri-elektron laser baseret på undulator og optisk kavitet.

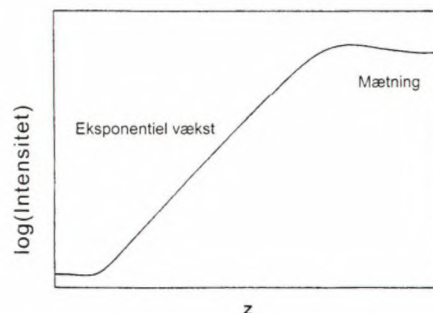
Fri-elektron laseren

Reflekteres undulatorstrålingen frem og tilbage ved spejle som vist på figur 3, kan der opnås forstærkning og laservirkning. Man taler da om en fri-elektron laser (FEL). I undulatoren opstår en vekselvirkning mellem det elektromagnetiske strålingsfelt og elektronerne, fordi de sidstnævnte under deres transversale bevægelse har en hastighedskomponent parallel med strålingens elektriske feltvektor. Vekselvirkningen fremkalder en rumlig modulation af elektrontætheden inden for elektronbundtet med en periodicitet lig med lysbølgelængden λ . På grund af denne effekt, som kaldes "microbunching", vil strålingen, der udsendes af de enkelte elektroner i bundtet, være indbyrdes kohærent. Strålingens intensitet vil derfor være proportional med kvadratet på antallet af elektroner i hvert elektronbundt, medens intensiteten af almindelig synkrotronstråling kun er proportional med antallet af elektroner. Endvidere vil vekselvirkningen lede til stimuleret emission, der yderligere forøger strålingens intensitet og kohærens, således at der bliver tale om en reel laservirkning.

Fri-elektron laseren udmærker sig ved at kunne levere en høj effekt (>1 kW) og ved forholdsvis let at kunne tunes via ændring af elektronenergien eller undulatorparameteren. Det brugbare bølgelængdeområde for eksisterende anlæg strækker sig fra 1 mm til $0,2 \mu\text{m}$. Hidtil har det ikke været muligt at konstruere en fri-elektron laser til frembringelse af røntgenstråling, da der ikke findes effektive reflektorer i dette bølgelængdeområde. For nylig er imidlertid en anden mulighed kommet inden for rækkevidde, uden

anvendelse af spejle. Ideen er at opnå laservirkning under et enkelt gennemløb af en lang undulator ved hjælp en selvorganiseret proces, der kaldes "Self-Amplified Spontaneous Emission (SASE)" [4].

Ved SASE-kørsel starter fri-elektron laseren fra støjniveau. I den første del af undulatoren er strålingen inkohærent, og intensiteten vokser lineært med den tilbagelagte afstand. Efterhånden vil den ovenfor omtalte vekselvirkning mellem elektroner og strålingsfelt lede til stimuleret emission og kohærens. Intensiteten vokser da eksponentielt med afstanden, indtil mætning er opnået (se figur 4).



Figur 4. Tilvækst i intensitet i fri-elektron laser baseret på SASE princippet.

SASE-princippet er blevet eksperimentelt afprøvet i mikrobølgeområdet. Den eksperimentelle bekræftelse for kortere bølgelængder har ladet vente på sig på grund af de meget store krav, der stilles på elektronstrålens stabilitet. Udvikling af elektronkilder med ekstremt lav emittans og lineære elektronacceleratorer i GeV-området har gjort, at SASE nu er kommet inden for rækkevidde også for kortbølget stråling. Ved Stanford Linear Accelerator Center (SLAC) og Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) i Hamborg er man i færd med at realisere fri-elektron lasere til blød røntgenstråling (VUV), og adskillige workshops er blevet afholdt [5].

Et studieprojekt ved acceleratorcentret i Stanford går ud på at udnytte dele af en eksisterende 50 GeV lineær accelerator som elektronkilde til en fri-elektron røntgenlaser. I en nær fremtid vil 2/3 af den 3 km lange accelerator blive beslaglagt af den såkaldte B-Factory til fremstilling af B-mesoner, mens den sidste kilometer vil kunne levere elektroner med 15 GeV energi til en fri-elektron laser. Principielt skulle der ikke være noget i vejen for at nå ned til bølgelængder svarende til hård røntgenstråling. Lignende projekter er på tegnebordet ved andre acceleratorcentre i USA.

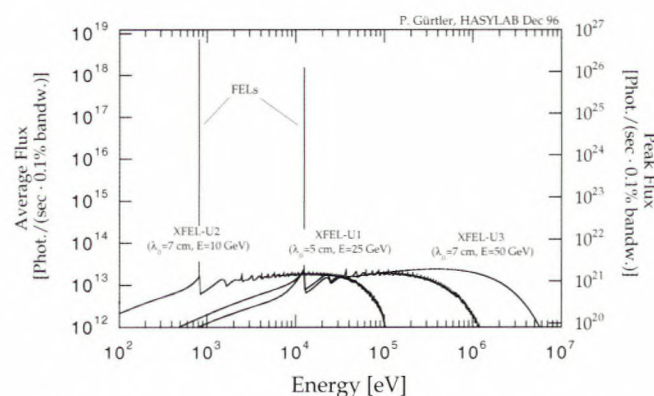
Ved DESY er det planen at udnytte lineæracceleratoren TESLA Test Facility (TTF) som elektronkanon til en fri-elektron laser, baseret på SASE-princippet. I første omgang vil man bruge en 390 MeV accelerator til en laser, der leverer stråling med bølgelængden 120 nm. Herved vil man kunne afprøve diverse komponenter og, hvad der er mest betydningsfuldt, for første gang kunne bevise SASE-princippets gyldighed for stråling

med så kort bølglængde. De superledende magneter er allerede på plads, og man regner med, at det første test af TESLA fri-elektron laseren vil finde sted inden for det næste halve år. Lineæracceleratoren vil derefter blive forlænget, således at det vil blive muligt at nå ned til bølglængden 70 nm. Det kan nævnes, at den 300 m lange fri-elektron laser vil indgå som et led i udstillingen World EXPO 2000 [6], der er åben 1. juni - 31. oktober 2000.

Den første fase af projektet forventes afsluttet i 2001, og derefter vil elektronenergien blive forhøjet til 1 GeV, samtidigt med, at undulatoren vil blive forlænget. Det skulle så være muligt at nå ned til bølglængden 6 nm. På det tidspunkt vil anlægget blive overdraget til brugerne. I en mere fjern fremtid (10-15 år) er det planen at bygge en fri-elektron laser til hård røntgenstråling, X-ray Free Electron Laser (XFEL), med bølglængden 0,1 nm (1 Å). Sidstnævnte laser vil i givet tilfælde indgå som en integreret del af et projekt, som højenergi-fysikerne ved DESY har på tegnebordet. Den planlagte lineæraccelerator vil kunne levere elektroner og positroner, hvis kinetiske energi er 500 GeV.

Videnskabelige anvendelser af røntgenlaseren

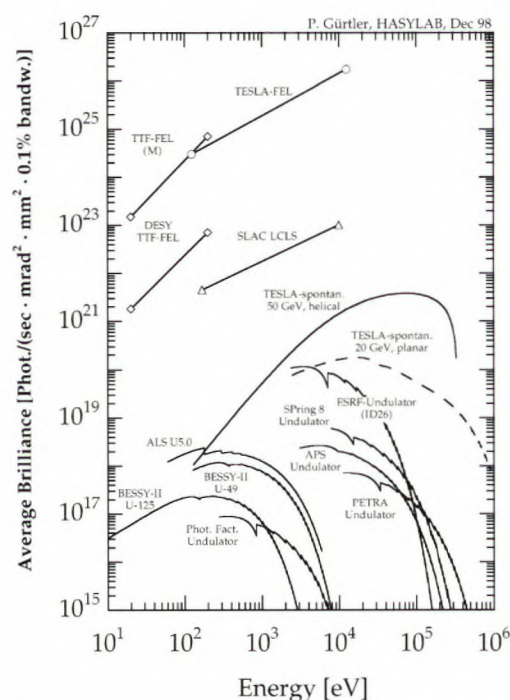
Fri-elektron lasere i VUV- og røntgenområdet vil kunne levere stråling med en brillans, der overtræffer dagens synkrotronstrålskilder med mange størrelsesordener. Laserstrålingen har desuden andre fordele, såsom rumlig kohærens og pulser med ekstremt kort varighed. Den rumlige kohærens vil kunne udnyttes til forskellige billedteknikker, såsom røntgenmikroskopi, holografi og interferometri. Men røntgenlaserens mest bemærkelsesværdige egenskab vil nok være det store energiindhold i hver enkelt puls. Det vil således blive muligt at foretage spektroskopiske og strukturelle undersøgelser baseret på en enkelt strålingspuls med en varighed af omkring 0,1 ps (10^{-13} s). Den meget høje pulsbrillans vil gøre det muligt at kortlægge flygtige og irreversible kemiske reaktioner og andre processer, som intensitetsmæssigt ikke kan studeres i dag.



Figur 5a. Fri-elektron laser sammenlignet med andre synkrotronstrålskilder. Fotonflux.

I røntgenområdet med bølglængder omkring 0,1

nm (1 Å) giver laseren nye muligheder. Vi vil her give et par eksempler indenfor undersøgelser af faste stoffer. Som vist i figur 5b har XFEL en middelbrillans der er 2-3 størrelsesordener højere end alle eksisterende kilder i dag. Hvorfor er brillansen vigtig? Brillans er ikke kun et udtryk for fluksen (antallet af fotoner pr. sekund), som man kan se af brillansens enheder $fotoner/(s \cdot mrad^2 \cdot mm^2 \cdot 0,1\% \text{ båndbredde})$, men er fluksen normeret til kildepunktets størrelse samt strålens divergens (se også box 1). Derfor er brillansen den afgørende enhed for en kildes kvalitet til anvendelser, der kræver høj opløsning. Endnu vigtigere for XFEL er pulsbrillansen (peak brilliance), defineret som brillansen per pulslængde. Pulsbrillansen er mere end 10 (!) størrelsesordener højere end de bedste kilder som ESRF eller APS i dag (jf. figur 5c). Ti størrelsesordener svarer nogenlunde til forskellen mellem en konventionel kilde med roterende anode og en af de bedste synkrotronstrålskilder idag.



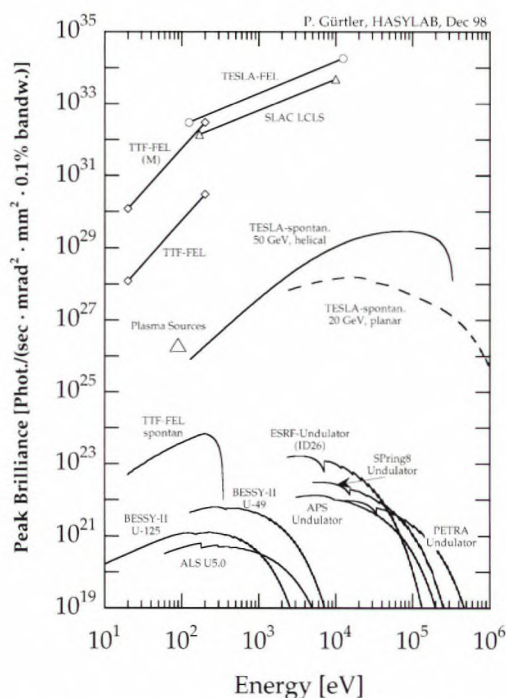
Figur 5b. Fri-elektron laser sammenlignet med andre synkrotronstrålskilder. Middelbrillans.

Den enorme pulsbrillans skyldes røntgenlaserens tidsstruktur. Røntgenstrålingen kommer i pulser af ca. 0,1 ps længde, og i en sådan puls vil der være 10^{12} - 10^{13} fotoner. Laseren startes af den stokastisk udsendte stråling fra den indkommende elektronpakke, og den udsendte røntgenpuls vil derfor indeholde støjbidrag med kortere tidsstrukturer end 0,1 ps. Kan disse detekteres og udfoldes fra det målte signal, kan tidsopløsninger bedre end 0,01 ps måske opnås. Antallet af fotoner pr. puls skal sammenlignes med, at der ud af et typisk strålerør i dag kommer 10^{13} fotoner per sekund. Det skal dog nævnes, at den stråle der kommer ud af en XFEL ikke er særlig monokromatisk.

Båndbredden er givet af antallet af poler i den ca. 30 m lange undulator og bliver omkring 0,1%. Dette er dog rigeligt til at udføre en række diffraktionseksperimenter, og ønskes en lavere båndbredde kan dette opnås på konventionel vis med en krystalmonokromator. Som det ses af figur 5a, indeholder spektret fra en XFEL også en bred komponent fra den spontane emission, som ikke er blevet selvforstærket, og som strækker sig op over fotonenergier på 100 keV. Også denne del af spektret er interessant, som vil blive diskuteret nedenfor. De nye anvendelsesområder for en XFEL ligger i eksperimenter der kræver:

- Kort tidsstruktur
- Høj kohærens
- Høj brillans

Efter gennemløb af fri-elektron laseren er elektronstrålens kvalitet forringet således, at yderligere laservirkning er udelukket. Elektronerne kan imidlertid stadig bruges i en undulator. En sådan efterfølgende undulator vil kunne levere røntgenstråling, hvis brillans er sammenlignelig med eller bedre end dagens 3. generations synkrotronstrålskilder.



Figur 5c. Fri-elektron laser sammenlignet med andre synkrotronstrålskilder. Pulsbrillans (peak brilliance).

Det hurtigst voksende felt indenfor synkrotronstråling i dag er makromolekylær krystallografi. Ved nye strålskilder som ESRF og APS udgør biologer og proteinkrystallografer over halvdelen af brugerkredsen. Den høje brillans og fluks fra synkrotronstrålskilderne har gjort det muligt at optage dataset af langt højere kvalitet end fra laboratoriekilder og at bestemme store strukturer med en opløsning på ca. 0,1 nm. Desuden kan det såkaldte faseproblem i strukturbestemmelsen overvindes ved at optage flere dataset

Box 2. Faseproblemet :

Røntgendiffraktion kan ifølge den velkendte Braggs lov opfattes som konstruktiv interferens mellem røntgenstråler reflekterede fra successive planer i en gitterplanskare. Hvert sæt af parallelle planer er kendetegnet ved Miller indices, hkl . Ved strukturundersøgelser er det nødvendigt for hver Bragg-refleksion at bestemme den såkaldte strukturfaktor, F_{hkl} . Den indeholder information om elektrontæthed og position af ethvert atom i krystallens enhedscelle. For makromolekylkrystaller som proteiner bliver F_{hkl} pga. det store antal atomer yderst kompliceret. Endvidere er størrelsen F_{hkl} i almindelighed et komplekst tal

$$F_{hkl} = |F_{hkl}| \exp(i\phi_{hkl})$$

hvor $|F_{hkl}|$ er modulen, og ϕ_{hkl} er fasen. Her opstår problemet, idet den målte intensitet af den pågældende røntgenrefleksion er proportional med kvadratet på modulen

$$I_{hkl} \propto |F_{hkl}|^2 \quad (7)$$

og fasen ϕ_{hkl} forbliver ukendt. Faseproblemet kan løses ved at måle intensitetsfordelingen i refleksionsmønstret to gange. I de to målinger skal et bestemt, tungere atom, der sidder et kendt sted i enhedscellen, have forskellige sprednings-evner. Hidtil har man opnået dette ved en kemisk metode, hvor man udskifter det pågældende atom med et andet (isomorf substitution). Ved anvendelse af synkrotronstråling er det muligt at benytte to forskellige bølgelængder nær en såkaldt absorptionskant λ_K for det tunge atom (svarende til en resonansfrekvens i atomet). Dette vil give en ændring i intensitet, som er direkte forbundet med fasen (anomal spredning). To målinger – en ved en bølgelængde, der er lidt kortere end λ_K , og en ved en bølgelængde, der er lidt længere – er ækvivalent med en isomorf substitution. Med anvendelse af synkrotronstråling er det muligt at optage flere dataset omkring absorptionskanten. Denne metode, som kaldes Multiple Wavelength Anomalous Dispersion eller MAD, har fået udstrakt brug inden for proteinkrystallografi.

omkring absorptionskanten for et tungere element for derved at variere spredningsfaktoren for det pågældende element (se også box 2). Disse muligheder, kombineret med det enorme videnskabelige og teknologiske potentiale, der ligger i at kende proteinstrukturerne på molekylært niveau, har gjort, at proteinkrystallografi har taget et kvantespring. I dag bruger de fleste større medicinalfirmaer således regelmæssigt

synkrotronstråling i deres forskningsarbejde. Ved den nye amerikanske synkrotron APS i Argonne har flere medicinalfirmaer opbygget deres egne målestationer.

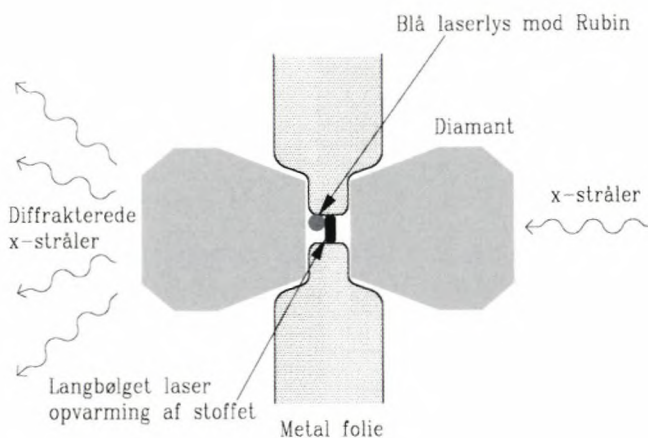
Grundlaget for proteinkrystallografien er, at proteinerne kan tænkes anbragt i et gitter således, at der kan opnås konstruktiv interferens mellem spredningen fra hvert protein. Imidlertid er omgivelserne i et gitter langt fra proteinets naturlige omgivelser. Desuden findes der proteiner, der ikke eller kun meget vanskeligt lader sig krystallisere, for eksempel overfladeproteiner der sidder i cellemembranerne. Hvad skulle der til for, at det ville være muligt at måle den spredte røntgenstråle fra et enkelt protein og derudfra rekonstruere proteinets struktur? Det er klart, at der kræves en særdeles intens røntgenstråle fokuseret ned til et lille område. Desuden ville proteinet meget hurtigt blive ødelagt på grund af strålingsbeskadigelsen, og et fuldstændigt dataset skal kunne optages inden beskadigelsen sætter ind. Det sidste krav, der skal opfyldes, er at man skal være i stand til manipulere et enkelt protein, således at det netop er på rette sted på rette tid for at blive ramt af røntgenpulsen. Der arbejdes i øjeblikket med undersøgelser af, om disse betingelser vil kunne opfyldes af en XFEL.

En pulslængde på 0,1 ps burde være kort nok til, at strålingsbeskadigelsen ikke spiller nogen rolle, idet beskadigelsen ikke kan nå at udbrede sig. Spørgsmålet er mere, om man kan opnå tilstrækkelig spredt intensitet fra et enkelt protein. Dette afhænger i høj grad af, om røntgenstrålen kan fokuseres tilstrækkeligt ned. Da strålen er fuldt kohærent transversalt, er det i princippet muligt at fokusere den ned til samme størrelsesorden som bølgelængden, om end det ikke er nødvendigt til dette formål. Desuden kræves der udvikling af nye matematiske teknikker for at rekonstruere proteinets struktur, idet der ikke længere er tale om spredning fra et periodisk gitter. Nu bliver spredningsmønstret dog ikke så diffust, som man umiddelbart skulle tro. Et protein indeholder faktisk temmelig meget orden, så den spredte stråling vil rumligt være kraftigt moduleret og minde om spredning fra en krystal.

En XFEL vil få stor betydning for studier af magnetiske materialer. De kraftigste, statiske magnetfelter ligger i dag i området 10-15 T. Felter over 50 T kan opnås i pulserede magnetiske felter, mens højere felter over 100 T kun opnås destruktivt, for eksempel ved at sende meget høje strømstyrker kortvarigt gennem kobberspøler. Eksperimenter ved disse ekstremt høje felter kan således ikke udføres stroboskopisk (cyklisk), men dataopsamlingen skal foretages indenfor en enkelt røntgenpuls. Det er ved sådanne eksperimenter røntgenlaserens høje pulsbrillans er afgørende. Andre eksempler er undersøgelser af systemer, der har en umagnetisk grundtilstand og en magnetisk tilstand, der kan eksiteres med en laser. Hvis levetiden af den eksiterede tilstand er i området 100 μ s, vil strukturen af den magnetiske tilstand kunne undersøges af et pulstog indenfor systemets henfaldstid.

Undersøgelser af stof ved meget høje tryk og store

og små temperaturer har betydning på mange områder. På de steder i solsystemet, hvor der findes stof, er en tilstand med atmosfæretryk og stuetemperatur absolut en undtagelse. Mere end 90% af alt stof befinder sig ved et tryk, der er større end 10 GPa (100 kbar) og en temperatur, der afviger meget fra 300 K. For at kunne beskrive jordens (eller andre planeters) indre, kræves der, at man kender fasediagrammet for jern og andre stoffer ved meget høje tryk og temperaturer. Geofysiske fænomener som for eksempel jordens magnetfelt, jordskælv og vulkaner vil kun kunne forstås ud fra et kendskab til stoffers opførsel ved meget høje tryk. Mange af de nye højtemperatur superledere får en forbavsende stor forøgelse af overgangstemperaturen til superledning, når de underkastes et tryk på op til 30 GPa (300 kbar). Nævnes kan også spørgsmålet om hvilket tryk, der er nødvendigt for at gøre luftarten brint metallisk med nye interessante egenskaber. Til anvendelser ved skærende bearbejdning og andre industrielle processer fremstilles kunstigt ved høje temperaturer og tryk en betydelig mængde hårde materialer som diamant og bornitrid. En optimering af disse processer foregår til stadighed.



Figur 6. Diamant trykcelle.

Til samtidig frembringelse af tryk op til 40 GPa (400 kbar) og temperaturer op til 3000 K ved et ca. 1 mm³ stor prøvevolumen sker der udvikling i retning af store apparater med mange stempler, der ved at presse symmetrisk om emnet kan frembringe hydrostatisk tryk kombineret med elektrisk opvarmning. Sådanne trykapparater vejer adskillige tons. Med små diamant trykceller kan man opnå tryk på op til 500 GPa (5 Mbar) og temperaturer op til 6000 K ved laseropvarmning. Endnu højere tryk kan kun opnås i chokbølger genereret ved eksplosioner eller pulserede lasere.

Diamant trykcellen består som vist på figur 6 af to diamant stempler, der sammenpresser et metalfolie. Med en relativt moderat kraft kan der opnås meget høje tryk, idet diamanternes trykflade er meget lille.

I foliet er der på forhånd boret et lille hul, der udgør trykkammeret, og hvis diameter er ca. 100 μm . Her anbringes det materiale, der ønskes undersøgt, tillige med en rubin krystal og en passende væske. Prøvens volumen er af størrelsesorden 10^{-4} mm^3 . Ved en argon laser kan rubin krystallen bringes til at lyse med en rød farve, hvis bølgelængde vokser med trykket i kammeret. Røntgenstråling sendes gennem diamanterne og diffrakteres på materialet. De diffrakterede stråler kan måles med forskellige detektorer, alt afhængig af de oplysninger om materialet, der ønskes.

Røntgenlasere vil blive benyttet til undersøgelser sammen med allerede nu kendte typer af trykapparater. Strålingens høje intensitet vil gøre det muligt at undersøge meget mindre stofmængder end i dag

og at opnå langt højere tryk, specielt for lette stoffer. Ligeledes vil synkroniseringen af røntgenstråling og intens laserlys, der kan frembringe et stort men kortvarigt tryk ved at en chok bølge passerer igennem materialet, være en nærliggende mulighed ved diffraktionsundersøgelser.

I forhold til voluminet af et materiale sidder der ikke mange atomer på en overflade. For at opnå tilstrækkelig intensitet i en røntgenstråle diffrakteret fra en overflade, er det nødvendigt med høje indkommende røntgenintensiteter på omkring 10^{13} fotoner pr. mm^2 . Dette opnås rutinemæssigt ved moderne synkrotroner i dag. Med en XFEL bliver det muligt at undersøge tidsopløste fænomener på en tidsskala helt ned til picosekunder.

Fysikshow i Århus

Af Kristian Mølhav og Klaus Seiersen.

Gymnasierne i Århus har nu mulighed for at få besøg af studerende fra Institut for Fysik og Astronomi på Aarhus Universitet, som laver et fysikshow på op i mod 90 minutters varighed. Showet er lærerigt, men også underholdende.

Under Dansk Naturvidenskabsfestival i september sidste år havde Det naturvidenskabelige Fakultet ved Aarhus Universitet arrangeret, at folkeskoleelever kunne besøge fakultetet i et stort cirkustelt opstillet i universitetsparken. I dette telt var der mulighed for at overvære en lille underholdende præsentation af fakultetets fag; fysik og kemi gav hver et lille show, geologerne fortalte om store dinosaurer, datalogerne legede med LEGO robotter, og også matematik, idræt, biologi og molekylærbiologi havde en stand. Besøget blev afsluttet fra en scene, hvor kemikerne lavede et stort kemishow med lys, farver og brag.

Forfatterne til denne artikel er begge studerende ved Institut for Fysik og Astronomi, og i festivalugen var vi ansat ved fysikstanden i teltet. Her morede vi os over glæden i elevernes øjne, når vi udførte nogle af de små sjove forsøg. Vi snakkede om at udvide det til et større show, som vi kunne rejse rundt på gymnasierne med. Sidst i december fik vi så en aftale med Marselisborg Gymnasium, hvorefter vi gik i gang med at stable det store show på benene.

Vi havde mange ideer, og da det første show blev afholdt sidst i februar, så havde vi nok til 90 minutters underholdning - og mere til. Inden udgangen af marts havde vi forevist showet til alle gymnasiets matematiske klasser, som udtrykte stor tilfredshed med oplevelsen. Dog fik 1. og 2.g'erne nok mest ud af det, da flere af tingene i showet allerede var blevet gennemgået på højniveauholdet.

Showet bliver afholdt klassevis. Det har den fordel, at vi har nemmere ved at snakke med de enkelte elever, som vi ofte stiller spørgsmål. Desuden har vi flere ting, som vi sender rundt eller går ud med blandt eleverne for at vise dem det på tæt hold. Som showet er opbygget nu, lægger vi ud med at tale om raketter (Danmark er jo blevet en rumfartsnation), og disse forklares med fænomenet impulsbevarelse, som kun de ældste elever har hørt om før. Så snakker vi om elektricitet (potentialer, strøm og spænding sammenlignes med et vandkredsløb) og elektromagnetisme (induktion, elektromagnetiske bølger, lys, farver). Det er mange svære emner, der behandles, men hvis de forklares på den rigtige måde, gerne suppleret med sjove forsøg, så får eleverne alligevel meget ud af det. Og hvis eleverne er lidt trætte til sidst, så vågner de altid op, når vi afslutter med at lave en god flødeis ved hjælp af flydende kvælstof. Vi er i øjeblikket kun to studerende på showet, men vi har fundet flere andre på institutet, som gerne vil være med, og som i den kommende tid skal "læres op". Dermed vil vi forhåbentlig fra efteråret af have nok personer til at dække den store interesse for showet, som vi forventer, når gymnasierlærerne får kendskab til showet.

Hvis du vil have besøg af Fysikshowet, så kontakt Kristian Mølhav (moelhav@ifa.au.dk) eller Klaus Seiersen (kls@ifa.au.dk).

Tribologi (smøring) er et emne, der længe kun har været angrebet fra en makroskopisk synsvinkel. Ved hjælp af scanning tunnel mikroskopet (STM) er man først indenfor de senere år begyndt at få indsigt i de atomare og molekulære processer, hvor de dynamiske aspekter er vigtige. Strukturelle ændringer på atomart niveau er forudsagt for meget tynde smørende film ("confined geometries"). For eksempel har det været foreslået at det velkendte fænomen "stick slip" (et emne hænger fast, indtil det pludselig slipper, og friktionen formindskes voldsomt, indtil hastigheden formindskes, friktionen stiger, og emnet hænger fast igen) skyldes en smelteovergang af smøremidlet. Friktionen er høj, når smøremidlet er i fast form, men under stigende belastning smelter det, og friktionen falder. Den smeltede fase er stabil, indtil hastigheden formindskes, og smøremidlet størkner. Dette har været eftervist i molekylær dynamik beregninger, hvor smøremidlet er en van der Waal væske, men det har ikke været eftervist eksperimentelt. Da tidsskalaen er kort, i mikrosekund området, kan eksperimenter formodentlig ikke umiddelbart udføres i dag, om end indledende forsøg allerede er foretaget ved at koble et røntgenbeam ind i en røntgenbølgeleder [7], hvori der senere skal fyldes et smøremiddel. Der er også blevet foretaget målinger i et "surface force apparatus", hvor en tynd film mellem to krummede mica plader undersøges. Problemet i begge disse typer målinger er, at det er vanskeligt at fokusere røntgenstrålen ned til tilstrækkelig små dimensioner og samtidig have tilstrækkelig intensitet til at foretage tidsstudier. Med andre ord er brillansen for lille ved dagens synkrotroner, men en XFEL vil kunne bane vej for sådanne målinger.

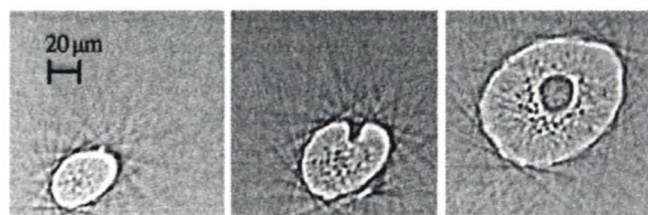
Et andet interessant aspekt ved XFEL er den spontane emission ved store fotonenergier omkring eller over 100 keV. Ved disse energier er der ingen laservirkning, det vil sige strålen er ikke kohærent, men som det ses af figur 5 er brillansen alligevel et par størrelsesordner højere, end hvad der kan opnås i dag. Denne del af spektret har anvendelser især indenfor materialeforskning og metallurgi til undersøgelser af tekstur, spændinger og korngrænsevækst. Røntgenstrålinger med energier omkring 10 keV trænger typisk kun få μm ind i materialer som kop- per eller jern og undersøger derfor kun det alleryderste område, som ikke behøver at være repræsentativt for hele materialet. Traditionelt har man i stedet brugt neutroner, der har indtrængningsdybder på flere cm. Neutronstråling har desværre den ulempe, at kilden har en uhyre lav brillans, idet kildepunktet har en stor rumlig udstrækning, og udstrålingen sker i alle retninger. Det er derfor ikke muligt at opnå en større rumlig opløsning end nogle få tiendedele millimeter. Røntgenstråling ved 100 keV har indtrængningsdybder i mm området, og på grund af den meget højere brillans end neutronkilder kan strålingen fokuseres således, at det er muligt at undersøge betydeligt mindre områder. Et såkaldt 3D

mikroskop udviklet i et samarbejde mellem ESRF og Forskningscenter Risø er netop blevet installeret ved ESRF. Målet er at nå ned på et målevolumen af ca. $5 \times 5 \times 50 \mu\text{m}^3$. Ved en XFEL kan dette volumen formodentlig formindskes ned til under $1 \mu\text{m}^3$, samtidigt med at det bliver muligt at lave tidsopløste studier. Dette vil være af stor betydning til undersøgelser af kinetikken af kornvækst i metaller.

En vigtig egenskab ved strålen fra en XFEL er kohærens. Alle eksisterende synkrotroner er inkohærente kilder, idet elektronerne udsender deres stråling uafhængig af hinanden. Med en inkohærent kilde kan der imidlertid opnås transvers kohærens, det vil sige kohærens vinkelret på udbredelsesretningen af strålen. Gøres forholdet mellem kildepunktets størrelse og afstanden mellem kilde og prøve tilstrækkelig lille, bliver strålen fra en inkohærent kilde tranverst kohærent. Den longitudinale kohærens, dvs. kohærens langs med udbredelsesretningen, er bestemt af monokromaciteten, for en XFEL altså af monokromatoren. Med eksisterende 3. generations synkrotronsstrålingskilder er det er muligt at opnå tranverst kohærent stråling over områder på ca. $10 \mu\text{m}$ – naturligvis på bekostning af intensiteten.



Figur 7a. Gifttand af edderkop. Fasekontrast billede.



Figur 7b. Gifttand af edderkop. Snitradiografier (mikrotomografi). På Kvants bagside findes et 3D billede fra 60 rekonstruerede tværsnit.

Ved en XFEL bliver det muligt at opnå transversal kohærens over flere hundrede μm med høj intensitet. Udnyttes en sådan stråle til diffraktion fra materialer, hvor der er områder med fasekontrast, opstår der "speckle" – analogt til hvad der kendes fra laserfysikken. Måles tidsafhængigheden i specklemønstret opnås information om dynamikken i systemet. Det kaldes korrelation spektroskopi og er en standard teknik, når målinger udføres med laserlys, men de meget kortere bølgelængder af røntgenstrålen gør det muligt at undersøge dynamikken på atomare

længdeskalaer.

Transvers kohærens muliggør fasekontrast mikroskopi i Gabor "in-line" geometri. Dette er en teknik, der er i de sidste par år er blevet voldsomt populær ved ESRF, og som udelukkende er mulig på grund af den høje brillans. Når man får taget røntgenbilleder på sygehuset eller hos tandlægen er kontrasten i billederne baseret på forskelle i absorption af røntgenstråling mellem væv og knogler. Men ofte ønsker man at undersøge emner, hvor der kun er meget små forskelle i absorption og derfor ingen kontrast. Har man en kohærent stråle, kan man i stedet udnytte, at en røntgenstråle refrakteres og derved får et faseskift, når den passerer igennem et materiale. I to forskellige materialer fås forskellige faseskift og dermed mulighed for interferens. Et eksempel er vist i figur 7 og i 3D-billedet på Kvants bagside, som er hentet fra ESRF's hjemmeside [8]. Med en XFEL er røntgenstrålen født fuldt transvers kohærent, hvorved det bliver det muligt at lave mikroskopi med højere opløsning, måske bedre end 100 nm.

Fremtiden

Det er ganske svært at spå om fremtiden, og de ideer, der er skitseret her til anvendelsen af en XFEL, er kun en ekstrapolation af, hvad der muligt ved eksisterende kilder i dag. Sammenligner vi med forløbet af udviklingen omkring den fælles europæiske synkrotronstrålingskilde ESRF, venter der mange nye og spændende videnskabelige udfordringer. Da ideerne til ESRF blev formet i begyndelsen af firserne, havde ingen forestillet sig den eksplosive udvikling, der er sket indenfor proteinkrystallografien, ej heller de nye muligheder den høje brillans gav til at udnytte den transverse kohærens til fluktuations spektroskopi og fasekontrast billeddannelse. De oprindelige design specifikationer på maskinen blev overtruffet med mere en størrelsesorden, på trods af at kravene var sat meget højt fra starten.

I forhold til landets størrelse har Danmark meget stærke forskergrupper indenfor alle områder af udnyttelsen af synkrotronstråling, samtidig med at en XFEL formodentlig vil realiseres i Hamborg kun få timers kørsel fra landets grænser. Dansk forskning baseret på synkrotronstråling står derfor i en meget stærk position til at udnytte mulighederne ved en XFEL, såfremt denne bygges. I den forbindelse ville det være ønskeligt med en fremsynet dansk forskningspolitik, som fastholder mulighederne for en fortsat dansk forskning helt i front.

Referencer:

- [1] M. Altarelli, F. Schlachter og J. Cross, Ultrabright X-rays. Scientific American, December 1998, p. 36.
- [2] J. M. Madey, Stimulated Emission of Bremsstrahlung in a Periodic Magnetic Field. J. Appl. Phys. 42, 1906 (1971).

- [3] P. Lawætz, Moderne Fysik. Polyteknisk Forlag 1991, p. 110 ff.
- [4] K.-J. Kim og M. Xie, Self-amplified spontaneous emission for short wavelength coherent radiation. Nucl. Instrum. Methods A 331, 359 (1993).
- [5] A Superbrilliant X-ray Laser Facility. <http://www.desy.de/~wroblewt/scifel.html>
- [6] Light for the New Millenium. <http://www.desy.de/expo2000/>
- [7] M.J. Zwanenburg et al., Phys. Rev. Lett. 82, 1696 (1999)
- [8] ESRF's hjemmeside: <http://www.esrf.fr/>



Robert Feidenhans'l er programleder ved Afdelingen for Materialers Fysik og Kemi, Forskningscenter Risø. Han interesserer sig især for overflader, overfladestrukturer, grænse- og spredning af røntgenstråler, herunder anvendelser af synkrotronstråling.



Leif Gerward er docent ved Institut for Fysik, Danmarks Tekniske Universitet (DTU). Han interesserer sig især for materialeundersøgelser med røntgenstråling, herunder anvendelser af synkrotronstråling.



Janus Staun Olsen er lektor ved Niels Bohr Institutet, H.C. Ørsted Laboratoriet. Han interesserer sig især for røntgendiffraction og anvendelser af synkrotronstråling, herunder materialeundersøgelser ved variation af tryk og temperatur.