

Tre tigerspring for materiale-forskningen

Materialeforskningens CERN. Sådan kan man beskrive de store nye forskningsfaciliteter, der for tiden er ved at blive bygget i hhv. Lund i Sverige og Hamborg i Tyskland.

Forfattere



Peter Kjær Willendrup
Senior Forskningsingeniør,
Institut for Fysik, DTU
pkwi@fysik.dtu.dk



Mads Ry Vogel Jørgensen
postdoc,
iNANO-Kemi,
Aarhus Universitet
mads@inano.au.dk



Kim Lefmann, lektor,
Niels Bohr Institutet,
Københavns Universitet
lefmann@nbi.ku.dk



Kristoffer Haldrup,
seniorforsker
Institut for Fysik, DTU
hald@fysik.dtu.dk

I denne og næste udgave af *Aktuel Naturvidenskab* er danske forskere inden for materialevidenskab i bred forstand gået sammen for at skrive en serie artikler, som illustrerer de nye muligheder, der åbner sig for dansk materialeforskning i den nære fremtid. Helt nye faciliteter er ved at blive bygget i Lund og Hamborg – i kort afstand fra og dermed let tilgængelige for alle de danske forskningsmiljøer. Nærmere bestemt er der tale om neutronkilden European Spallation Source (ESS), der opføres af et stort europæisk konsortium med svensk-dansk værtskab, den europæiske fri-elektron røntgen-laser, European X-ray Free Electron Laser (E-XFEL), der opføres med tysk værtskab, samt den svenske MAX IV synkrotron-røntgenkilde. De tre faciliteter kommer til sammen til at udgøre en slags "materialeforskningens CERN", hvor nærmest alle typer af materialer kan undersøges ved hjælp af en række højt specialiserede instrumenter. Ved at studere og udvikle nye materiale typer er det håbet, at forskningen kan hjælpe til med at løse en lang række af samfundets problemer indenfor fx miljø- og klima, energi, transport, medicin og sundhed.

Nærværende artikel beskriver de tre faciliteter, hvordan de tre faciliteter komplementerer hinanden samt hvilke instrumenter ved faciliteterne, der har særlig dansk interesse.

Røntgen og neutroner

Fælles for alle de eksperimentelle teknikker, der beskrives i dette tema, er, at de undersøger vekselvirkningen mellem en røntgen- eller neutronstråle og en materialeprøve.

Som beskrevet i kvantemekanikken kan energi (lys) opføre sig som enten bølger eller partikler. På samme måde kan partikler opføre sig som enten bølger eller partikler. Det viser sig, at neutroner,

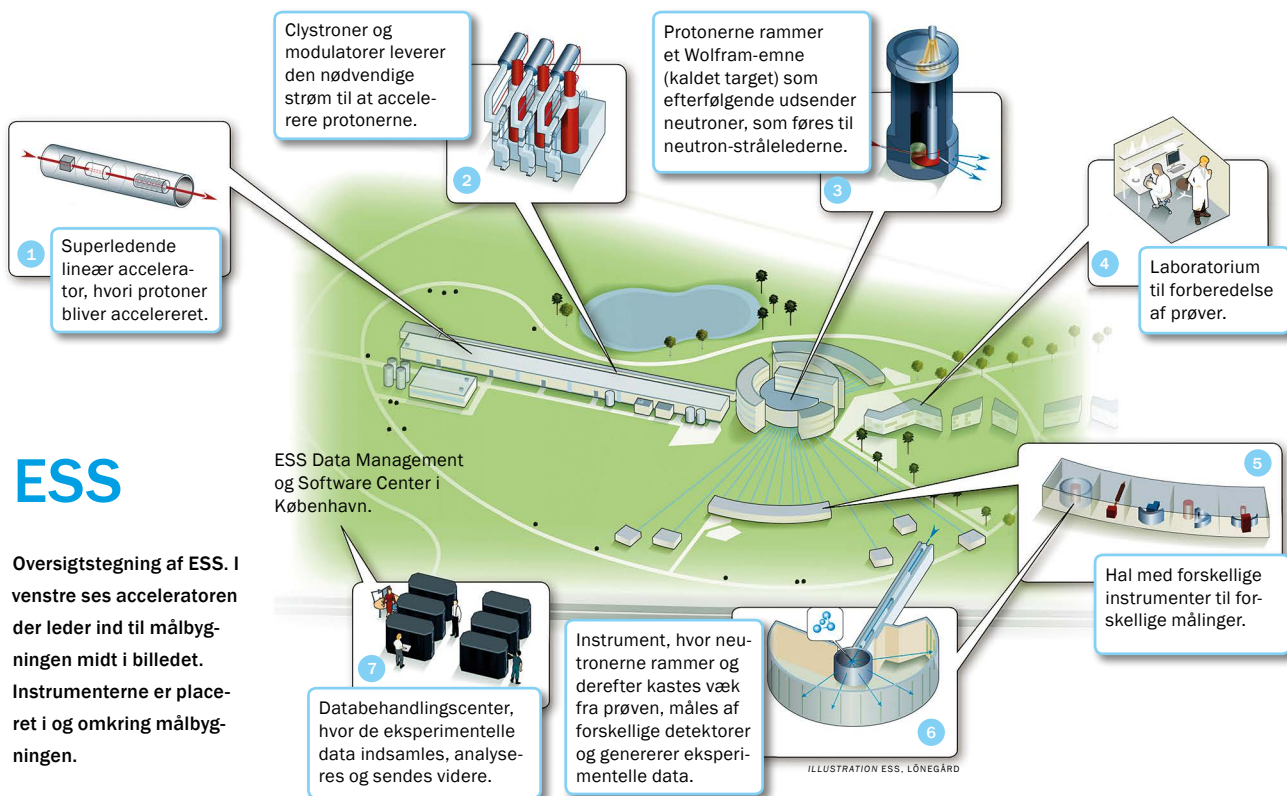
der er kommet i termisk ligevægt med et materiale ved stuetemperatur, har en bølgelængde på 0,1 - 1 nm, altså tæt på afstandene mellem atomerne og lidt længere end bølgelængden af røntgenstråling. Derfor kan man "se" atomer med både røntgen- og neutronstråling. Men neutronerne ser mere end bare atomerne: De vekselvirker også med magnetisme i materialerne og med de vibrationer, som atomerne i materialerne laver.

Det er særligt for neutronen, at den ikke har nogen ladning og derfor kun vekselvirker svagt med de fleste materialer. Det gør, at man kan se ind i meget store prøver eller sende strålingen gennem tykke vægge på fx køleenheder eller magneter, hvis man vil undersøge prøven under specielle fysiske forhold. Der er eksempler på eksperimenter, hvor en hel motorblok fra en lastbil er blevet undersøgt.

En anden særlig egenskab for neutronen er, at den kan optage energi fra eller afgive energi til det materiale, den vekselvirker med. Energien bliver omsat til/fra vibrationer i materialet. Det kan udnyttes til at undersøge, hvordan vibrationerne har indflydelse på et materiales egenskaber.

Når man lyser på en prøve med neutronstråling spredes strålerne ved vekselvirkning med atomkerne, og denne spredning skaber et unikt mønster af stråling på grund af interferens mellem stråler spredt fra de enkelte atomer. Når man studerer sammenhængen mellem den stråling, der sendes ind mod prøven og den stråling, der udsendes fra prøven, kan man med forskellige metoder både måle strukturer i materialet og dynamiske fænomener.

Neutroner fornemmer atomer meget anderledes end røntgenstråling. Hvor neutroner vekselvirker med atomkernen, vekselvirker røntgen med elektronerne,



og jo flere elektroner i et givent materiale, jo mere spredes røntgenstrålerne. Med røntgen kan man derfor let "se" guld, men det er svært at se fx ilt, hvis det er i nærheden af guld, da den stærke spredning fra de tunge guldatomer overdøver spredningen fra de meget lettere ilt-atomer. Ligeledes er det svært fx at se forskel på mangan og jern, da de står lige ved siden af hinanden i det periodiske system, og derfor spreder næsten ens.

Med neutronernes mere komplicerede vekselvirkning med atomkernerne er det derimod let at se oxygen i nærheden af guld, og det er let at se forskel på mangan og jern. På den anden side er intensiteten af røntgenstråler fra synkrotroner mange gange kraftigere, og visse eksperimenter er derfor lettere at lave med røntgen end med neutroner.

Verdens kraftigste neutronkilde

ESS-faciliteten, der er under opførelse i Lund i Sverige med tilknyttet datacenter i København, bliver verdens langt kraftigste neutronkilde.

ESS er en spallationskilde, hvor intens neutronstråling laves ved at bombardere et tungt grundstof med protoner, der bevæger sig tæt på lysets hastighed. Kilden og instrumenterne er tilsammen så dyre, at de fleste lande ikke kan bygge dem alene. Derfor bygges ESS med Danmark og Sverige som værter og med 15 andre europæiske lande som samarbejdspartnere.

Neutronerne, der produceres, skal benyttes på den bedste måde. Derfor bliver en række forskellige instrumenter placeret rundt om kilden. Tilsammen vil de 22 instrumenter være i stand til at lave

Nye faciliteter – og instrumenter med et dansk islæt

Alle tre nye faciliteter får instrumenter med et dansk islæt: European Spallation Source skal forsynes med i alt 22 instrumenter, hvoraf de 12 foreløbig er besluttet ud fra en række indsendte forslag. Tre af de accepterede forslag blev fremsat af et dansk-schweizisk konsortium. Derudover er stort set alle neutronguides, der skal anvendes på ESS, designet i Danmark ved brug af det danske simuleringssoftware McStas. Denne ekspertise ligger også bag de helt nye design bag de dansk-schweiziske ESS-instrumenter.

På MAX-IV bliver DANMAX-instrumentet den danske adgangs-

vej til garanteret brug af instrumenter ved faciliteten. Instrumentet designes og bygges på DTU og AU. Det er tanken, at det danske simuleringssoftware McXtrace skal benyttes til design af instrumentet.

På E-XFEL bliver instrumentet FXE en dansk in-kind leverance, dvs. at arbejdet med design og konstruktion udføres i Danmark for danske midler og gælder som del af det danske medlemskab af E-XFEL. Det er foreslået, at det danske simuleringssoftware McXtrace kan benyttes som del af dataanalysen på FXE-instrumentet.

Produktion af neutronstråler

Neutronen blev første gang eksperimentelt bekræftet, da englænderen James Chadwick i 1932 lavede forsøg med at sende alfa-partikler ind i beryllium, hvorved der blev dannet kulstof og neutroner.

Til fremstilling af kraftige neutronstråler benyttes i dag to andre metoder: fission og spallation. Fission foregår i en kernereaktor. Her fanges langsomme neutroner af U-235 kerner. Kernen splittes herefter til to nye kerner og udsender samtidig to-tre neutroner. Disse neutroner kan splitte endnu en U-235 kerne og dermed starte en kædereaktion. Den ene neutron benyttes til at opretholde kædereaktionen, mens de andre kan bruges til andet, fx til at foretage spredningseksperimenter.

Spallationsprocessen foregår ved, at protoner accelereres til hastigheder tæt på lysets, hvorefter de rammer en tung atomkerne som fx kviksølv, bly eller wolfram. Det resulterer i en meget ustabil kerne, som hurtigt udsender en sky af både protoner, neutroner og gammastråling. En af fordelene ved spallationskilder er, at der ikke er en kædereaktion, der skal



Neutronen blev teoretisk foreslået i 1920. I 1932 fastlog englænderen James Chadwick med eksperimenter, at neutronen var en partikel med en masse tæt på protonens og uden ladning. Chadwick fik i 1935 Nobelprisen i fysik for opdagelsen af neutronen.

Foto: Los Alamos National Laboratory.

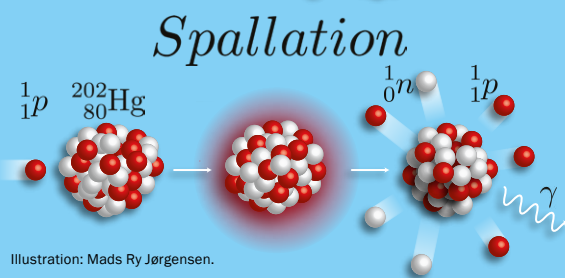
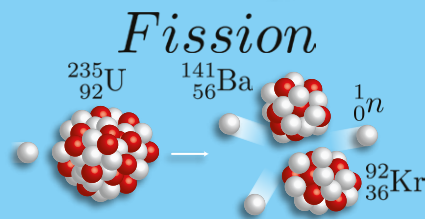
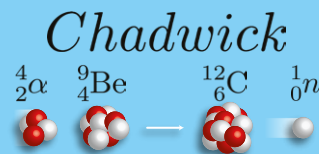


Illustration: Mads Ry Jørgensen.

kontrolleres. Hvis neutronproduktionen skal stoppes, slukkes acceleratoren. Ved både fission og spallation sendes hurtige neutronerne ud i alle retninger. Neutronerne skal derefter bremses op, enten i vand eller flydende hydrogen. Derefter er det muligt at guide neutronerne, så de hovedsageligt sendes mod instrumenterne placeret rundt om kilden. Ved ESS i Lund bliver de korteste instrumenter ca. 10 meter lange, mens de længste bliver ca. 160 meter lange.

De første materialevidenskabelige eksperimenter med neutroner blev udført under og lige efter 2. verdenskrig i USA og Canada, som havde bygget kernereaktorer i forbindelse med Manhattan-projektet. Her viste det sig, at neutroner kunne bruges til at studere struktur, magnetisme og gittervibrationer i materialer. Dette arbejde gav Clifford Schull og Bertram Brockhouse Nobelprisen i fysik i 1994.

eksperimenter til udforskning af stort set alle typer materialer. I oktober 2014 blev de første 12 instrumenter udvalgt, men der er stadig plads til (mindst) 10 yderligere instrumenter, som forskergrupper og industri senere kan indsende forslag til.

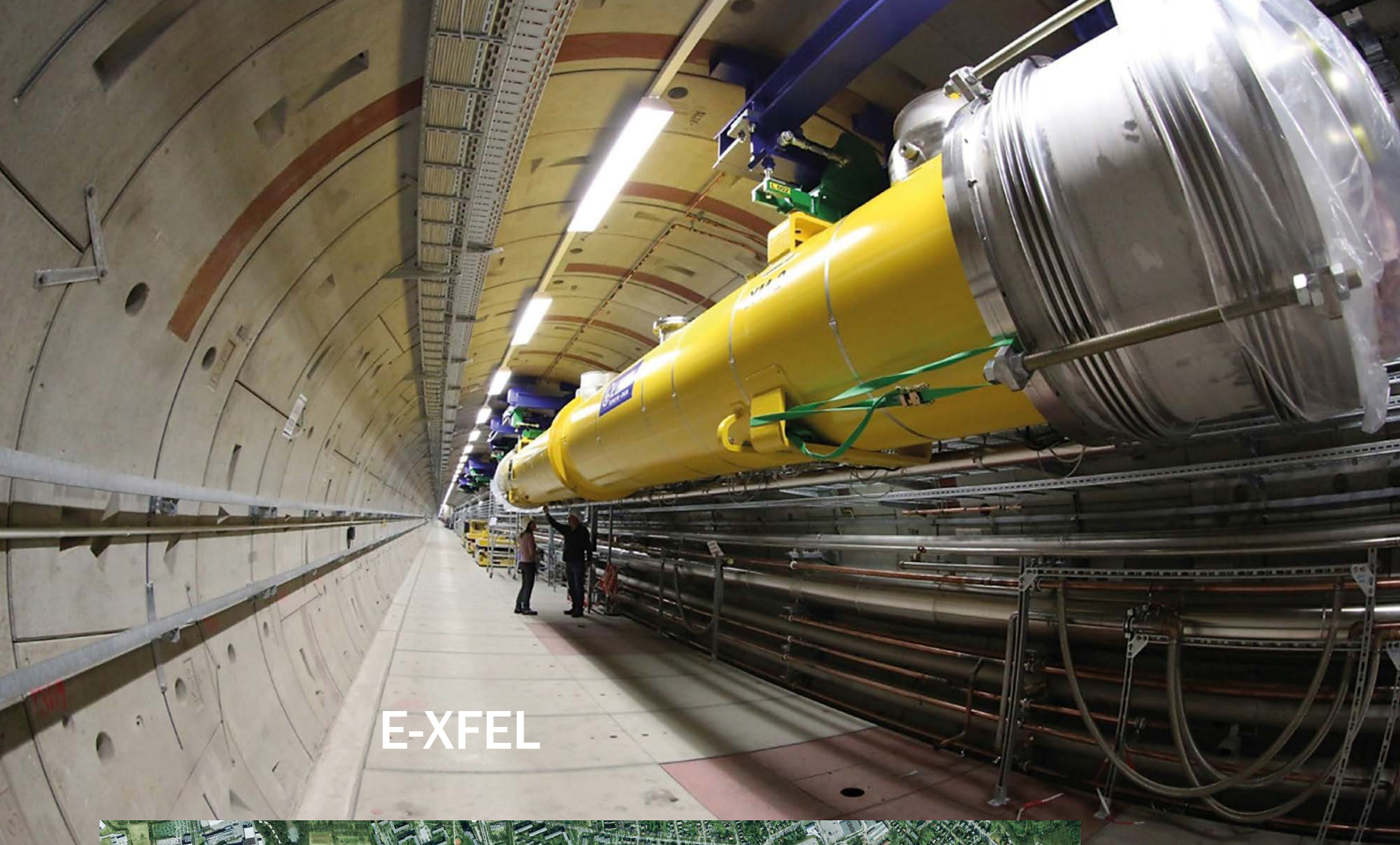
Selve kilden består af en ca. 600 m lang superledende lineær accelerator, der accelererer protoner til en energi på 2,5 GeV (giga-elektronvolt), hvilket svarer til 96 % af lysets hastighed. Protonerne sendes herefter ind i et svinghjul lavet af wolfram med en diameter på 2,5 m og en vægt på næsten 5 ton. Effekten af protonstrålen vil nå op på 5 MW, så hjulet roterer (med 25,5 omdrejninger pr. minut) og er kølet med heliumgas for at forhindre, at det smelter. Når protonerne støder ind i wolframatomerne, sker spallationsprocessen, hvor wolframkernerne deles i mindre dele, og der udsendes neutroner. Før neutronerne kan anvendes ved instrumenterne, skal de "køles ned" til lavere energier, hvilket kan gøres med fx vand ved stuetemperatur eller fly-

dende brint. Efter "nedkølingen" føres neutronerne vha. neutronguider ud til instrumenterne, som er placeret i forskellige afstande fra kilden – helt op til 160 m væk.

En kraftig laser – der skyder med røntgenstråling

I lighed med ESS faciliteten er E-XFEL, der er under opførelse nær Hamborg i Tyskland, et stort internationalt projekt med deltagelse af 12 lande, heriblandt Danmark.

Ligesom ESS er E-XFEL og andre røntgenlasere baseret på en lang, lineær accelerator, hvor ladede partikler accelereres op til 17,5 GeV, svarende til en hastighed ganske tæt på lysets. I E-XFEL er de ladede partikler elektroner i stedet for protoner, og i stedet for at ramme et metal, bliver bundter af elektronerne sendt igennem et flere hundrede meter langt magnetsystem, en såkaldt undulator. Magnetterne sætter elektronbundterne i svingninger, og



E-XFEL



Foto: © DESY 2014

Foto af del af installationen af den 3,4 km lange accelerator på E-XFEL.

Acceleratoren starter ved Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY) i Hamburg og løber 3,4 km under jorden til byen Schelefeld.

takket være deres ekstreme hastighed og omhyggeligt skræddersyede egenskaber vekselvirker elektronbunderne kraftigt med det udsendte røntgenlys. Det får elektronerne i et bundt til at danne yderligere mikro-bundter, som alle svinger i takt, hvilket får den udsendte røntgenstråling til at blive tusinder af gange kraftigere. Strålingen fra elektronerne ligner på mange måder laserlys, og derfor kaldes denne type facilitet ofte en fri-elektron-laser.

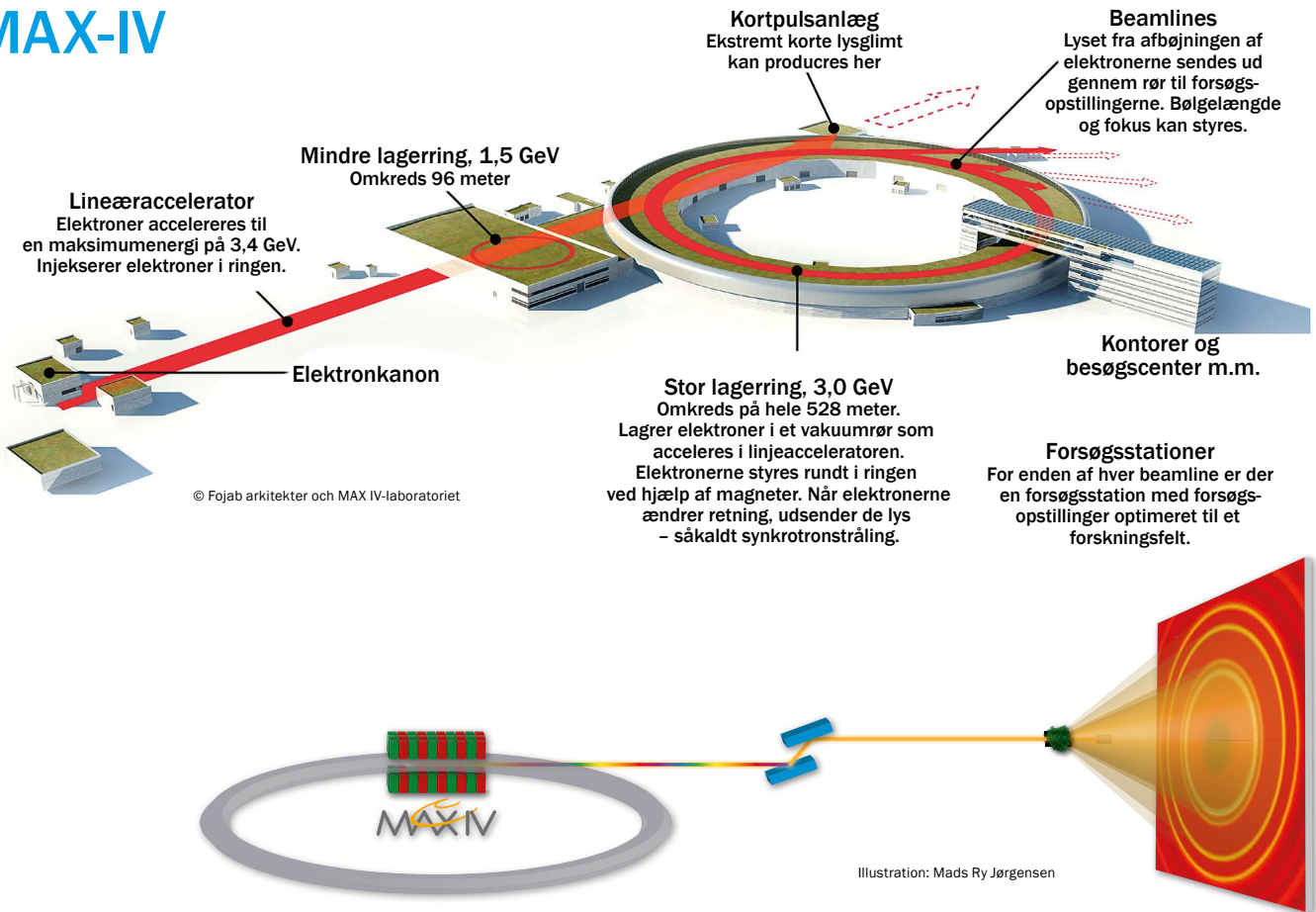
Pulserne af røntgenlys fra en fri-elektron-laser er udover at være utroligt intense også kendetegnet ved at være exceptionelt korte, typisk under 100 femtosekunder (en næsten ufattelig kort tidsenhed, da et femtosekund = 10^{-15} sekunder). Kombinationen af ultra-korte og ultra-intense pulser af røntgen åbner døre til en lang række af eksperimenter, som hidtil har været umulige, og man forventer, at den Europæiske XFEL vil bidrage med banebrydende eksperimenter indenfor mange områder, fra protein-studier til materialefysik og kemi.

Acceleratoren starter ved Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY) i Hamburg og løber 3,4 km under jorden til byen Schenefeld, hvor facilitetens 6 instrumenter deler strålingen fra i alt 3 undulatorer. Instrumentet Femtosecond X-ray Experiments (FXE) bliver en dansk leverance til XFEL i et samarbejde mellem DTU Fysik og det danske firma JJ X-ray. Kombineret med et avanceret lasersystem til at "kickstarte" de kemiske reaktioner og bevæbnet med en lang række forskellige detektorsystemer vil dette instrument populært sagt blive i stand til at se ind i selve reaktionspilen i de kemiske reaktionsligninger.

MAX IV synkrotronen

Lige ved siden af det sted, hvor ESS opføres i Lund, er en anden stor facilitet ved at blive færdiggjort, nemlig MAX IV synkrotronen. I modsætning til de lineære accelerators på ESS og E-XFEL får MAX IV en såkaldt lagerring, en ringformet accelerator som både kan accelerere og lagre partikler. I lagringen

MAX-IV



Skematisk tegning af pulverdiffraktions-beamline, fx i forbindelse med DANMAX på MAX-IV facilliteten. Røntgenstrålingen genereres, når elektronerne i lagringen passerer igennem magnetfelterne i undulatoren. En enkelt bølgelængde

vælges ud vha. en monokromator og sendes ind mod prøven. Røntgenstrålingen vil blive spredt som kegler. Intensiteten og positionen af disse kegler optages på en detektor og kan bruges til at modellere den atomare struktur.

Røntgenstråling og røntgenkilder



Verdens første røntgenbillede: Røntgens kones hånd.

Røntgenstråling er elektromagnetisk stråling ligesom almindeligt synligt lys og radiobølger, men det har en meget kortere bølgelængde: 5 pm til 10 nm. Den korte bølgelængde betyder, at røntgenfotonerne har en høj energi – faktisk så høj, at de kan skade molekyler, herunder vores DNA, og strålingen kaldes derfor ioniserende stråling.

Røntgenstråling kan fremstilles ved hjælp af røntgenrør (som i tyskeren Wilhelm Röntgens oprindelige eksperiment fra 1895), hvor elektroner accelereres mod en anode af metal. Elektronerne bliver bremsede brat, dvs. kraftigt accelereret, når de rammer de tunge metalatomer, og denne acceleration af ladede partikler udsender røntgenstråler. Strålingen fra et røntgenrør er ikke særlig intens, men heldigvis findes der andre måder at accelerere elektroner og derved lave røntgenstråling.

I en synkrotron accelereres elektronerne først i en lineær accelerator op til hastigheder tæt på lysets, hvorefter de skydes ind i en ringformet accelerator (selve synkrotronen), hvor yderligere accelerator-moduler vedligeholder elektronernes

energi, imens meterstore magnetiske elementer rundt om ringen på forskellig vis accelererer elektronerne i buede eller slalom-formede baner. Denne acceleration får elektronerne til at udsende stråling, der er mange størrelsesordere kraftigere end fra et røntgenrør. MAX IV i Lund åbnede i 2016 og er en topmoderne synkrotron, der på flere parametre vil slå alle de eksisterende røntgenkilder.

Til at danne intens røntgenstråling kan man også benytte en enkelt, men meget kraftigere, lineær accelerator og en meget lang magnetstruktur med flere tusinde magneter med Nord-Syd pegende skiftevis hver vej, sådan at den stråling, der udsendes fra hver enkelt elektron, kommer i fase. Denne type accelerator kaldes en fri-elektron laser, da røntgenstrålingen har nogle af de samme egenskaber som en laserstråle, og intensiteten er mange gange kraftigere end selv en synkrotron. E-XFEL i Hamborg vil fra 2017 producere stråling, der er så kraftig, at den vil ødelægge mange af de prøver, der sættes ind i strålen. Heldigvis er pulserne så korte, at man kan nå at få et billede, inden prøven ødelægges en brøkdel af et sekund senere.

Oversigt over instrumenter med dansk deltagelse

Instrument	Facilitet, status	Forskningsområde	Dansk engagement
CAMEA	ESS, accepteret, ligger i anden fase	Spektrometer, studier af dynamik i komplekse faststofsyste­mer som fx superledere, magnetiske materialer med mere.	Designet i Dansk- schweizisk samarbejde mellem DTU, KU, EPFL Lausanne og Paul Scherrer Institut
DANMAX	MAX-IV, aftale om Dansk-Svensk sam-arbejde netop indgået	Billeddannelse og diffraktion. Anvendelser indenfor en bred vifte af materialevidenskab, fysik, geologi mv.	Dansk-designet instrument, samarbejde mellem DTU og AU
ESTIA	ESS, accepteret, ligger i første fase	Reflektometri, studier af materiale-overflader.	Danske grupper på SDU og KU er oplagte brugere og gav indspil til science case
FXE	E-XFEL, formel konstruktionsfase påbegyndt	Ultrahurtig dynamik af kemiske systemer.	Dansk-designet instrument, samarbejde mellem DTU og det danske firma JJ-Xray.
HEIMDAL	ESS, accepteret, ligger i anden fase	Multi-disciplin instrument til strukturundersøgelser på flere skalaer, kombinerer diffraktion, småvinkel-spredning og imaging.	Designet i Dansk- schweizisk samarbejde mellem AU, KU, og Paul Scherrer Institut
LOKI	ESS, accepteret og formel konstruktionsfase påbegyndt	Småvinkelspredning på bløde materialer, herunder biologiske systemer.	ESS-designet instrument, med Danske interessenter fra bl.a. KU
MIRACLES	ESS, ansøgning netop indsendt	Spektrometer, studier af komplekse systemers dynamik, fx i glasser, biologiske systemer og brintlagring.	Designet i samarbejde mellem KU og ESS. Oplagte brugere på både RUC, KU og DTU
ODIN	ESS, accepteret og formel konstruktions-fase påbegyndt	Billeddannelse og diffraktion. Anvendelser indenfor en bred vifte af materialevidenskab, fysik, geologi mv.	ESS-designet instrument, med danske interessenter fra bl.a. KU og DTU

producerer MAX IV ekstremt intens røntgenstråling ved hjælp af elektroner med en energi på 3 GeV. MAX IV benytter specielle magneter i lagringen og kan derfor producere endnu mere intens røntgenstråling end andre lignende synkrotroner. Den intense stråling er specielt velegnet til såkaldt in-situ materialeforskning, hvor man undersøger materialer i realtid og under realistiske arbejdsbetingelser. Et eksempel kunne være op- og afladning af et batteri.

Samtidig gør de specielle magneter i MAX IV, at røntgenstrålerne kan fokuseres ned til få nm. Her ved kan man undersøge struktur og egenskaber i meget små områder i en prøve.

Forsøgene med røntgenstrålingen foregår ved en række individuelle instrumenter (instrumenter koblet på synkrotroner kaldes "beamlinjer"), der er placeret hele vejen rundt om lagringen. Hver af disse beamlinjer koster omkring 100 mio. kr., men der er alligevel stærk konkurrence om hvilke forskningsfelter/metoder, der skal have prioritet, da der kun er plads til ca. 20. Nogle af de planlagte beamlinjer ved MAX IV er allerede reserverede til specifikke instrumenter og metoder, mens andre stadig er åbne over for forslag fra forskningsinstitu-

tioner og industrielle udviklingsafdelinger.

En række danske materialeforskere er gået sammen og har stillet forslag om, at Danmark bygger en beamlinje til materialeforskning på MAX IV (kaldet DANMAX), der skal kunne bruges til eksperimenter med imaging og såkaldt pulverdiffraktion. Beamlinjen fokuserer på rigtige materialer under realistiske betingelser målt i realtid. En stor del af arbejdet bliver derfor at udvikle prøvemiljøer og eksperimentelle opstillinger, hvor forskerne kan opnå de ønskede betingelser og samtidig få eksperimentelle data af høj kvalitet.

Valuta for skattekrone

Ved at anvende neutron- og røntgenstråling – og ofte i kombination – er man i stand til at undersøge en mængde materialer og besvare vigtige videnskabelige spørgsmål indenfor mange fagområder, fx. fysik, kemi, biologi, medicin, geologi, arkæologi og ingeniørvidenskaberne. Materialeforskning er en vigtig brik i løsningen af mange store samfundsudfordringer indenfor energi, sundhed, miljø, osv. Så formentlig har bidragsyderne til ESS, MAX-IV og X-FEL, altså Europas skatteborgere, fået valuta for pengene, når regnskabet skal gøres op om 40-50 år. ■

Læs/lær mere:

Mere om ESS:
<http://europeanspallation-source.se>
 Her kan man finde både film om faciliteten og 360° visualisering

Film om MAX-IV
<http://vimeo.com/57051515>

Mere om XFEI
<http://www.xfel.eu>