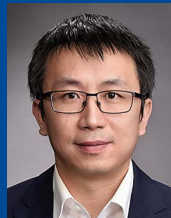
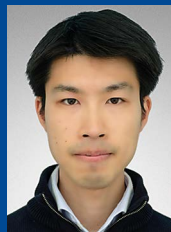


Dronefoto af Røntgenfri-  
elektronlaser (XFEL)-  
faciliteten LCLS i Califor-  
nien. Foto: Olivier Bonin/  
SLAC National Accelerator  
Laboratory

Forfatterne

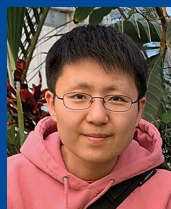


Shuai Wei er lektor ved Institut for Kemi på Aarhus Universitet. Hans forskning fokuserer på strukturen og egenskaberne af amorfe materialer ved hjælp af røntgen- og neutronspreddning. shuai.wei@chem.au.dk



Tomoki Fujita er postdoc ved Institut for Kemi på Aarhus Universitet, hvor han undersøger strukturen og dynamikken i amorfe materialer og krystal-linske faste stoffer. tofu@chem.au.dk

Shuai Wei og Tomoki Fujita er begge tilknyttet Aarhus Universitets materialeklynge, AU Materials.



Yanwen Sun er Staff Scientist ved LCLS på SLAC National Accelerator Laboratory i Californien, USA. Hendes forskning fokuserer på at udvikle næste generations ultrahurtige røntgeninstrumentering samt på struktur og dynamik i uordnede systemer.

# RØNTGENLASER FILMER ATOMERNES BEVÆGELSE



**Med en gigantisk røntgenlasermaskine – en såkaldt XFEL – kan forskere nu tage billeder så hurtigt efter hinanden og med så høj opløsning, at man kan registrere atomernes bevægelse i uordnede materialer som glas eller en strømmende væske.**

**D**et forrige århundrede var en triumf for reduktionismen – en videnskabelig og filosofisk tilgang, der forsøger at forklare komplekse fænomener ved at bryde dem ned i fundamentale bestanddele: fra makroskopiske objekter til molekyler, fra molekyler til atomer, dernæst protoner og neutroner, så elektroner, kvarker og måske endda vibrerende strenge. Samtidig blev naturens fundamentale kræfter udtrykt i elektromagnetismen, tyngdekraften samt den stærke og svage vekselvirkning. En stræben, der afspejlede et ønske om at afsløre en enkelt elegant lov – en universel regel, der kan forklare alt.

På den anden side viste der sig kompleksitet overalt. Så snart vi ser udover det enkelte atom, er virkelige materialer blevet stadig mere komplicerede i takt med, at vores viden er øget. Selv i “perfekte” krystaller, hvor atomer gentager sig som enheds-celler i et ordnet mønster, findes der altid defekter og uorden. I sit berømte essay i tidsskriftet *Science* “*More Is Different*” fra 1972 bemærkede den amerikanske fysiker Philip Anderson – ofte betragtet som den mest indflydelsesrige fysiker indenfor faststoffysikken i det 20. århundrede – at når mange partikler samles, opstår nye og uventede fysiske love. Disse såkaldt emergente love er i overensstemmelse med

den fundamentale fysik, men de kan ikke udledes direkte fra denne. Superledning er et slående eksempel: Den kollektive dans af elektroner skaber et fænomen, som ingen enkeltpartikel-lov kan forudsige. Anderson bemærkede, at “det dybeste problem i faststoffysikken i det 21. århundrede er problemet med uordnede og komplekse systemer.”

## **Glas og væsker er komplekse systemer**

Blandt de mange eksempler på komplekse stoffer skiller glas og væsker sig ud. Atomerne i glas og væsker er ikke ordnet som i krystaller, men viser i stedet uordnede mønstre. I videnskaben refererer

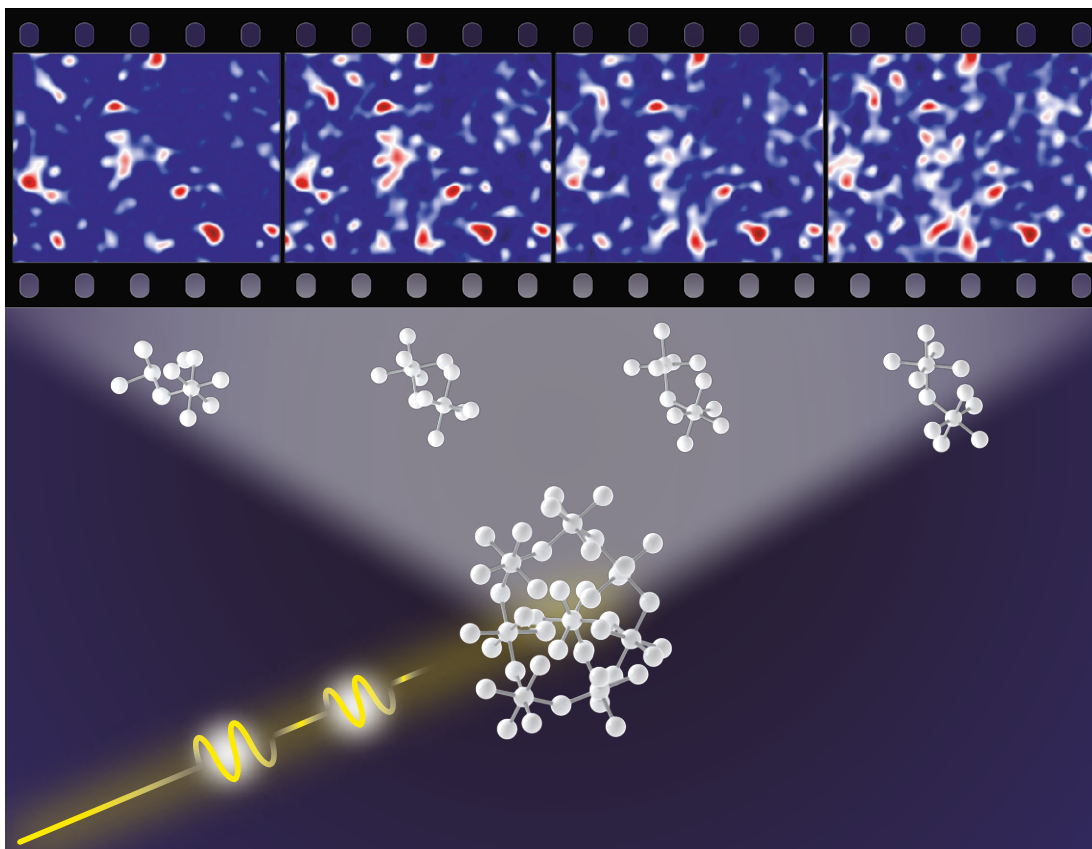


Illustration: forfatterne.  
Reprinted with permission from *The Journal of Chemical Physics* 162, 194201 (2025).

Figuren illustrerer nederst, at tvillingepulser fra XFEL rammer en prøve af et glasmateriale og gør det muligt at optage en film af, hvordan materialet ændrer sig med atomar opløsning. Filmen består af changerende kornede prikker kaldet speckle-mønstre (øverst), som repræsenterer atomernes placering i materialet.

“glas” ikke kun til gennemsigtige vinduesglas eller smartphone-skærme, men også bredt til mange typer amorfe, faste stoffer som metalliske glas, polymerer, chalcogenidglas, organiske systemer og endda amorf is (som menes at være den mest almindelige form for vand i universet).

At beskrive disse uordnede systemer er en skræmmende opgave. I modsætning til i krystallinske materialer findes der ingen strukturel enhed, som atomer gentager, når de udfylder pladsen. På et område på størrelse med en æggeblomme findes der således cirka  $10^{23}$  atomer, der tilsyneladende er tilfældigt arrangeret. For at gøre det endnu værre, bevæger disse atomer sig hele tiden. Afhængigt af temperaturen kan atomer bevæge sig så langsomt, at deres positioner næppe ændrer sig i millioner af år ved lave temperaturer; eller de kan bevæge sig næsten lige så hurtigt

som lydens hastighed (cirka 200 m/s) ved høje temperaturer nær smeltepunktet.

Hvis vi skal forstå sådanne systemer, må vi derfor som forskere kunne måle, hvordan atomerne er arrangeret i rum og tid på atomart niveau.

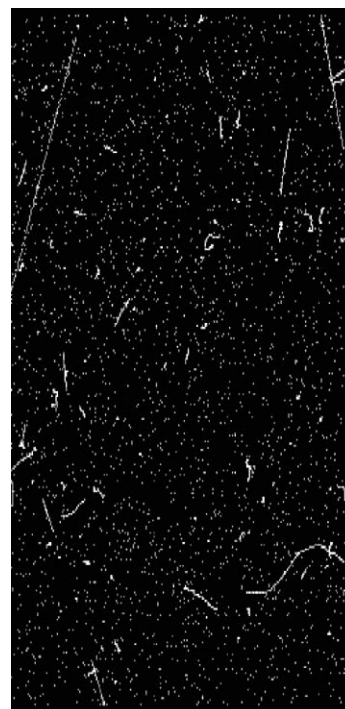
### Krav til et “atomkamera”

For at optage en ægte atomfilm har vi brug for et særligt kamera med en usædvanlig hurtig “lukker”. To krav er afgørende:

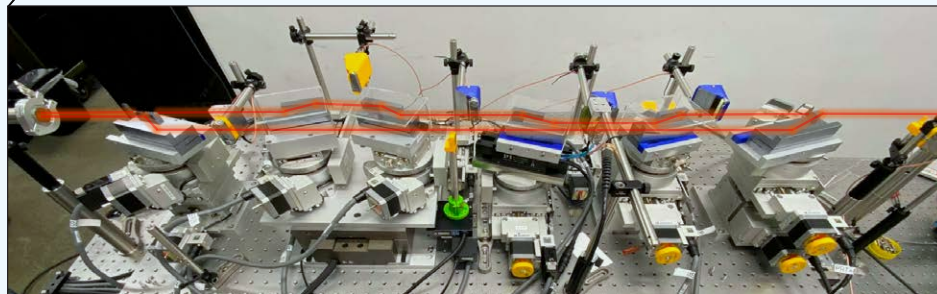
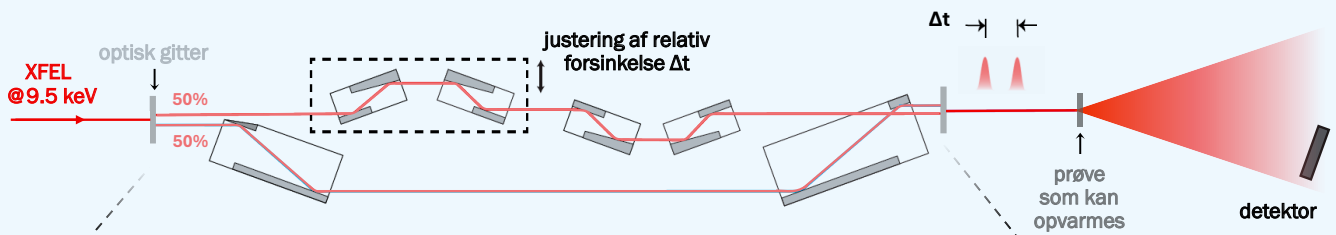
Rumlig opløsning fin nok til at se de enkelte atomer.

Eksposeringstider korte nok til at tage to på hinanden følgende billeder med mindre end  $10^{-12}$  sekunders mellemrum, så atomernes bevægelse fanges i realtid.

Først skal kameraet kunne “se” atomerne – altså opnå en opløsning



Detektorerne er så følsomme, at de også opfangede tilfældige kosmiske stråler fra rummet under målingerne (de hvide streger). Illustration: forfatterne.



Illustrationen viser princippet i split-og-forsink-optikken. Optikken splitter en enkelt røntgenpuls i to pulser. Den ene rejser en længere vej end den anden. Når de kombineres igen, er en puls forsinket med nogle hundrede femtosekunder. Illustration: Yanwen Sun

fin nok til at skelne dem. Atomer er utroligt små, kun omkring 2 ångstrøm i diameter (1 ångstrøm =  $10^{-10}$  meter), svarende til omtrent en halvtredstusindedel af tykkelsen af et menneskehår. Takket være opdagelsen af røntgenstråler, har vi et værktøj, der i princippet gør det muligt at se atomer.

Røntgenstråler er en særlig type lys, som har en bølgelængde på samme skala som atomer – dvs. som kan måles i ångstrøm. Det gør røntgenstråler ideelle til at afsløre atomstrukturer. Når røntgenstråler vekselvirker med stof, skaber de diffraktionsbilleder i det, fysikere kalder det reciproke rum (som i en slags mærkeligt spejl). Fysikere som William Lawrence Bragg og Max von Laue udviklede geniale matematiske metoder til at oversætte disse diffraktionsbilleder tilbage til, hvordan atomerne er arrangeret i det virkelige rum. Denne tilgang har været spektakulært succesfuld for krystaller, herunder løsningen af DNA's helixstruktur.

For uordnede materialer er opgaven imidlertid langt mere kompliceret. Almindelig røntgendiffraktion mister faktisk noget information, fordi røntgenbølgerne ikke er helt i takt. I ordnede krystaller betyder dette ikke meget, men i uordnede

materialer som glas og væsker bliver det et grundlæggende problem. For at bevare informationen om den uordnede struktur har vi brug for perfekte røntgenbølger, der er helt i takt. Forskere kalder dette "kohærente røntgenstråler", hvor bølgerne er i fase med hinanden. Det betyder, at bølgetoppene og bølgedalene falder sammen i tid og rum, og at de svinger med samme frekvens og i samme retning. Med sådanne røntgenstråler kan man opnå billeder, der, selvom de ligner tilfældige kornede prikker (se figuren næste side), faktisk er fingeraftryk af atompositioner i det virkelige rum. Kort sagt er kohærente røntgenstråler den nøgleingrediens, der gør det muligt at bygge et kamera, der kan afsløre de skjulte atomarrangementer i uordnede materialer.

### Kunsten at splitte en røntgenpuls

Den anden udfordrende opgave er at få røntgenstrålen til at tage billeder meget hurtigt. Atomer, der bevæger sig med lydens hastighed, lyder måske ikke særlig hurtigt. Men når de kun flytter sig en meget kort afstand – nogle få atomafstande – bliver det ekstremt svært at måle. Det betyder, at kameraets lukker som tidligere nævnt skal være så hurtigt som  $10^{-12}$  sekund.

Hvis du er vant til at arbejde med et kamera, så ved du, at forudsætningen for, at man kan opnå et brugbart billede, er, at der kommer lys nok ind i kameraet. Med andre ord skal vi for at tage billeder af atomer have pakket tilstrækkeligt mange fotoner i en enkelt pakke – en "røntgen-puls" – og lade dem vekselvirke med materialet. Med en såkaldt XFEL (der står for *X-ray Free Electron Laser*) har en puls en varighed på  $50 \times 10^{-15}$  sekunder, eller 50 femtosekunder.

I princippet kan vi tage et billede indenfor denne korte tid. Men et enkelt billede er ikke nok, fordi vi ønsker at optage en film – altså så vi kan se, hvordan atomer bevæger sig fra tidspunkt 1 til tidspunkt 2. Forskellen mellem de to tidspunkter er mindre end  $10^{-12}$  sekunder. Med andre ord skal vi producere to røntgenpulser, der følger efter hinanden med en tidsforsinkelse på  $10^{-12}$  sekunder. Hvordan gør man det?

Forskere har brugt årtier på at udvikle optik til at opnå netop dette, hvilket absolut ikke er trivielt. Ideen er at bruge spejle til at splitte en røntgenpuls i to tvillingepulser og lade dem rejse ad to forskellige stier. Den ene rejser en lidt

længere vej end den anden, og det betyder, at denne puls bliver forsinket i forhold til den anden. Efter denne rejse bliver tvillingepulserne kombineret igen for at vekselvirke med materialet – den ene efter den anden med en lille tidsforsinkelse imellem. Denne geniale idé gør det muligt for forskere nøjagtigt at kontrollere tidsforskellen mellem ankomsten af pulserne ved præcist at justere de stier, de rejser.

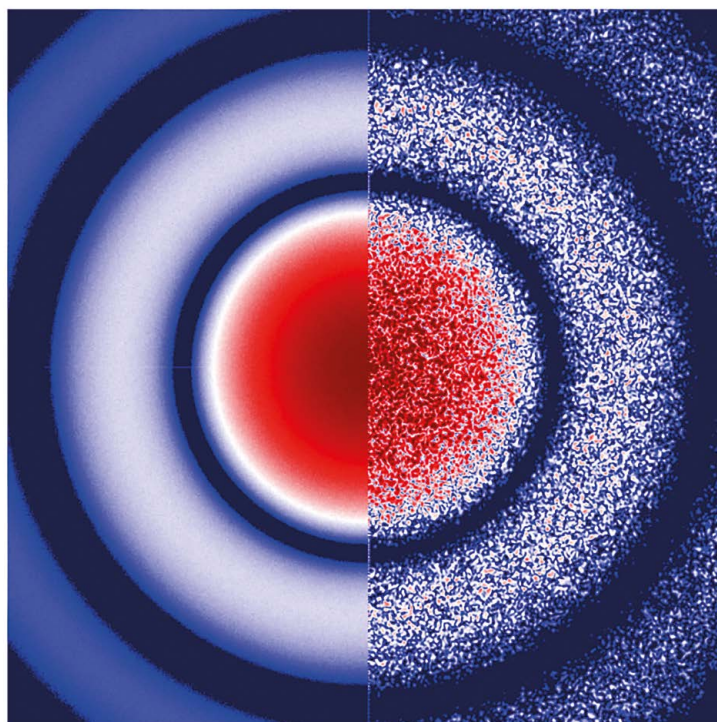
I praksis er det dog meget svært at opnå i laboratoriet. Eksperimenterne kræver nemlig, at tvillingepulserne efter opdeling og rekombination er nøjagtig ens og næsten perfekt i takt. Små forskelle kan føre til støj, der gør det umuligt at se meningsfulde signaler.

### En ægte atomar film

For nylig har vi demonstreret, at de to kritiske krav til at optage en ægte atomar film nu kan opfyldes. Vores kamera brugte røntgenlyskilden ved XFEL-faciliteten LCLS, som ligger i Bay Area nær Stanford University – en gigantisk maskine med 100 meter lange tunneler til at accelerere elektroner til næsten lysets hastighed for at generere næsten perfekt kohærente tvillingepulser af røntgenstråler, pakket med et enormt antal fotoner. Vi har udviklet en metode til at overvåge præcisionen af tvillingepulserne samtidig med, at vi måler atompositioner i uordnede materialer.

På grund af de uordnede strukturer er signalerne fra atompositionerne svage. Af denne grund skal de detektorer, der opfanger signalerne, være meget følsomme. De detektorer, vi brugte, var så følsomme, at de også opfangede kosmiske stråler – energirige partikler fra rummet – mens vi målte materialets atompositioner. Selv med så svage signaler kunne vi ved hjælp af matematiske metoder udtrække atompositionerne i rum og tid.

Vores analyse af mere end en million billeder viser, at selv i uordnede



Sammenligning af røntgendiffraction fra almindelige røntgenstråler (venstre) og mere informativ detektion med kornede prikker fra kohærente røntgenstråler (højre). Illustration: Yanwen Sun.

strukturer korrelerer atomer stadig med hinanden lokalt over korte afstande (nogle få atomafstande). Disse lokale atomordener fluktuerer mellem høj og lav i et meget hurtigt tempo. Vi har således set, hvordan den lokale orden kunne forsvinde på mindre end  $10^{-12}$  sekund.

### Fremtiden er lys

De nuværende atom-film af uordnede strukturer er stadig begrænset til blot nogle få billeder. De er begrænset af, hvor mange pulsetvillinger de nuværende XFEL-kilder kan levere hvert sekund. Alligevel markerer denne præstation et gennembrud for eksperimentelle værktøjer, der beviser, hvordan vi kan bruge verdens mest kraftfulde røntgenlasere til at få et glimt af atomernes bevægelse.

I øjeblikket findes der ingen omfattende teori, der pålideligt kan beskrive eller forudsige, hvordan atomer udvikler sig i uordnede systemer. Det er blandt andet derfor, at næste generation af røntgenfaciliteter – såsom LCLS-II-HE i USA

og European XFEL – er så spændende. Disse maskiner vil levere langt flere røntgenpulser, hurtigere dataindsamling og endnu mere følsomme detektorer. Tilsammen vil de åbne op for det fulde potentiale af denne teknik og give forskere mulighed for at følge atomernes bevægelse i både tid og rum med hidtil uset detaljerigdom.

Når disse eksperimentelle datasæt bliver tilgængelige, vil vi kunne bruge kunstig intelligens til at opdage skjulte mønstre i de tilsyneladende kaotiske omarrangementer af atomer. Nye teoretiske rammer kan derefter opstå, ligesom Braggs' krystallografi revolutionerede vores forståelse af ordnede krystallinske materialer for mere end 120 år siden.

Sådanne fremskridt vil være afgørende for at opdage og designe de avancerede materialer, vi har brug for i det 21. århundrede – fra bæredygtig energilagring og effektiv computerhardware til nye lægemidler og genanvendelige plastmaterialer. ■

### Videre læsning

T. Fujita, Y. Sun, H. Li, T. J. Albert, S. Song, T. Sato, J. Moesgaard, A. Cornet, P. Sun, Y. Chen, M. Mo, N. Amini, F. Yang, P. Lucas, V. Esposito, J. Vila-Comamala, N. Wang, T. Mamyrbayev, C. David, J. Hastings, B. Ruta, P. Fuoss, K. Sokolowski-Tinten, D. Zhu, S. Wei, Femtosecond x-ray photon correlation spectroscopy enables direct observations of atomic-scale relaxations of glass forming liquids. *The Journal of Chemical Physics* 162, 194201 (2025)

Y. Sun, M. Sutton, S. Wei, Analysis strategy for ultrafast X-ray photon correlation spectroscopy. *MRS Commun.*, doi:10.1557/s43579-025-00716-x (2025).