

## URÝCHĽOVAČ ČASTÍC XFEL A JEHO VÝZNAM PRE MATERIÁLOVÉ INŽINIERSTVO

V. Girman

*Katedra fyziky kondenzovaných látok, UPJŠ, Košice  
vladimir.girman@upjs.sk*

### **Abstrakt**

Cieľom príspevku je informovať vedecko – výskumných pracovníkov z oblasti materiálového inžinierstva o nových možnostiach, ktoré bude poskytovať zariadenie XFEL. Samotný projekt je realizovaný v centre urýchľovačov častíc DESY (Deutsches Elektronen – Synchrotron) v Hamburgu. Treba zdôrazniť, že to nebude štandardná nadstavba doterajších zariadení a rozšírenie ich možností. Zariadenie XFEL bude zdrojom RTG žiarenia výnimočných kvalít, presahujúci všetky súčasné svetové zdroje. To až do takej miery, že môžeme hovoriť o vytvorení úplne nového spôsobu spoznávania hmoty na atomárnej úrovni.

### **1. Niečo o projekte XFEL**

Z historického a technologického hľadiska vychádza projekt XFEL z lineárneho TeV – ového urýchľovača TESLA, navrhnutého predovšetkým pre potreby časticovej fyziky. Podieľalo na sa ňom 55 inštitúcií z 12 krajín. Urýchľovač TESLA bol natoľko inovatívny, že sa ukázal ako vhodná technologická báza pre vybudovanie nového zdroja extrémne tvrdého RTG žiarenia s mimoriadne vysokou intenzitou, produkovaného voľnými elektrónmi. V centre DESY sa preto začalo s výstavbou TESLA Test Facility (TTF). Vo februári v roku 2000 sa na TTF podarilo emitovať žiarenie s vlnovou dĺžkou pod 100 nm. Vývoj pochopiteľne neustal, a to čo pôvodne začalo ako testovacie zariadenie TTF, dostalo v auguste 2005 konečnú podobu a názov FLASH (Free – Electron Laser in Hamburg) a podtitul pilotný program XFELu. FLASH dodnes produkuje laserové svetlo s vlnovými dĺžkami v škále od extrémne ultrafialových až po mäkké RTG žiarenie. Svetlo je produkované v pulzoch, podobne ako pri elektronickej blesku s tým rozdielom, že pulzy na zariadení FLASH sú o  $10^{11}$  krát kratšie. Po všetkých úpravách má nakoniec jeden pulz trvanie len 10 fs a obsahuje približne toľko fotónov, koľko môžeme získať z najlepšieho svetelného zdroja dneška za

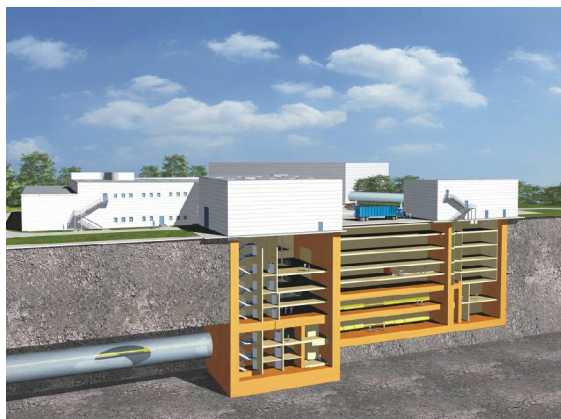
1 s. Stále sa však na zariadení FLASH pracuje so žiarením po oblasť mäkkého RTG žiarenia. Overenie a potvrdenie dôležitých fyzikálnych javov a konštrukčných prvkov na pilotnom programe FLASH umožnilo 8. januára 2009 spustiť očakávanú výstavbu pôvodne plánovaného synchrotrónového lineárneho urýchľovača XFEL (X – ray Free – Electron Laser) štvrtej generácie. Skúšobné uvedenie do prevádzky je naplánované na rok 2014 a definitívne by mal byť XFEL dostupný pre užívateľov v roku 2015.

Do projektu XFEL je zapojených 14 krajín: Nemecko, Veľká Británia, Švajčiarsko, Švédsko, Čína, Španielsko, Rusko, Slovensko, Francúzsko, Poľsko, Maďarsko, Taliansko, Dánsko a Grécko. Celkové náklady na výstavbu XFEL zariadenia sa predbežne odhadujú na 1,086 mld. euro. Z toho najväčšiu časť hradí Nemecko. Slovenská Republika je zmluvne zaviazaná podieľať sa každoročne na financovaní jedným percentom.

### **2. Technické parametre XFELu**

Ako už bolo naznačené, XFEL je konštruovaný ako supravodivý lineárny urýchľovač, s celkovou dĺžkou 3,4 km. Z toho urýchľovacia časť bude zaberáť 2,1 km, za ňou nasledujúca undulátorová časť

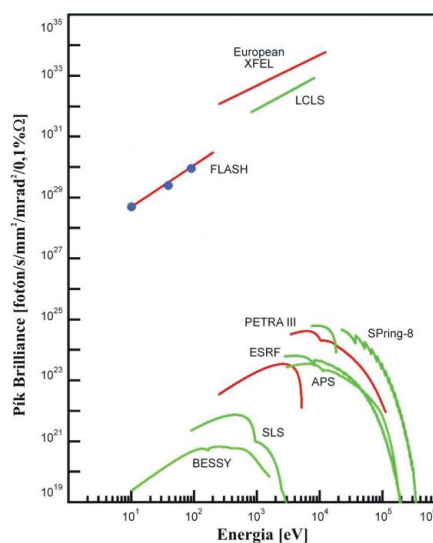
si vyžiada 1,2 km a zvyšok bude tvoriť experimentálna hala s desiatimi stanovišťami na piatich fotónových vetvách a celkovou plochou približne 4500 m<sup>2</sup>. Celý urýchľovač bude uložený v hĺbke 6 až 38 m pod úrovňou zeme (obr. 1).



Obr. 1: Schematický náčrt injektora elektrónov (vpravo), v strede sú priestory na prístup k urýchľovaču, a vľavo je modulátorová hala slúžiaca na generovanie elektromagnetických pulzov potrebných na urýchlenie elektrónov. Budovy nad zemou obsahujú chladiace zariadenia, ktoré udržiavajú urýchľovaciu časť na teplote 4,2K. (prevzaté z [1]).

Plánovaná energia urýchleného elektrónového zväzku je na výstupe urýchľovača rovných 20 GeV. To umožní získať fotónové žiarenie s vlnovou dĺžkou od 0,01 do 1,6 nm. Získané RTG žiarenie sa bude vyznačovať širokým a spojitým energetickým spektrom, ktoré bude vysoko kolimované s malou divergenciou na úrovni laserových lúčov, silne polarizované a emitované vo veľmi krátkych pulzoch. Doba trvania jedného pulzu bude menej ako 100 fs. Jeden pulz bude pritom obsahovať minimálne 10<sup>9</sup> elektrónov a časová vzdialenosť medzi jednotlivými pulzmi bude 200 ns. To znamená približne 30 000 pulzov za 1 sekundu. Dôležitou charakteristikou bude vysoká intenzita synchrotrónového žiarenia, ktorá sa udáva veličinou

Brilliance. Jej hodnota dosiahne 5.10<sup>33</sup> [fotón/s/mm<sup>2</sup>/mrad<sup>2</sup>/0,1%Ω], čím rádovo o 10<sup>12</sup> prevýši doteraz známe najvýkonnejšie zdroje RTG žiarenia (vid'. obr. 2). Dôležitým parametrom bude aj priemer zväzku elektrónov, ktorý sa bude pohybovať na úrovni rádovo v jednotkách nanometrov [2].

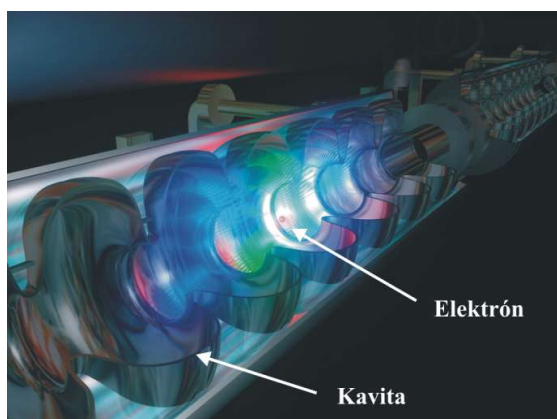


Obr. 2: Porovnanie pík Brilliance. XFEL výrazne prekonáva doterajšie najvýkonnejšie urýchľovače v DESY, ESRF, APS, alebo Spring8 [1].

### 3. Stručný princíp činnosti XFELu

S vynechaním detailných informácií možno princíp činnosti XFELu opísať nasledovne. Celý proces získavania extrémne tvrdého RTG žiarenia začína v injektore, ktorého dĺžka je 66 m. V ňom sú voľné elektróny generované ožarovaním Cs<sub>2</sub>Te katódy ultrafialovým laserom. Tieto elektróny sú okamžite vyvedené a fokusované elektrickým poľom do sústavy prvých rádiových frekvenčných kavit s gradientom 40 MV/m, ktoré im udelia výstupnú energiu približne 120 MeV. Elektróny následne putujú do 2,1 km dlhej sústavy 101 modulov. Každý z modulov pritom obsahuje niekoľko supravodivých rádiových frekvenčných nióbových kavit

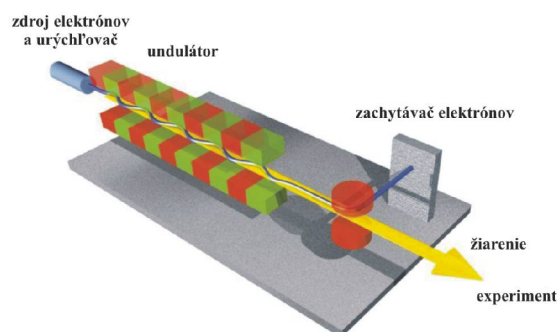
(obr. 3) s gradientom 23,6 MV/m, chladených na teplotu 2 až 4,2K. V tejto časti sú elektróny opäť elektrickým poľom urýchľované na rýchlosť 99 % z rýchlosti svetla a energiu 20 GeV. Súčasťou urýchľovacej časti sú okrem iného prislúšenstva aj magnety, ktoré majú za úlohu fokusovať zväzok elektrónov na požadovanú hodnotu.



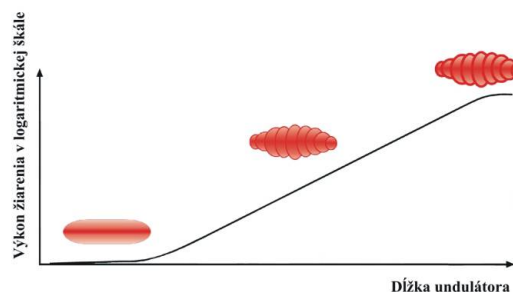
Obr. 3: Supravodivá kavita v urýchľovacej časti lineárneho urýchľovača a názorne naznačený jeden elektrón [1].

Po urýchlení postupujú elektróny do undulátorovej časti. Tá je koncipovaná ako sústava tvrdých magnetov s alternujúco usporiadanými pólmi (obr. 4). Rozdeľuje sa na 5 vetiev podľa toho, aké parametre od žiarenia vyžadujeme. Elektróny sú v undulátore postupne vychýľované z jednej strany na druhú v dôsledku striedania magnetických pólů. Podľa zákona zachovania energie sa každá zmena hybnosti elektrónu následne prejaví vyžiarovaním fotónu. Emitované synchrotrónové žiarenie však ešte stále nemá očakávanú intenzitu. Tú získa až tzv. SASE efektom (Self – Amplified Spontaneous Emission). Vyžiarené fotóny interagujú s elektrónmi v tom istom mraku, a to takým spôsobom, že tie elektróny, ktoré sú vo fáze so žiarením sú brzdené, zatiaľ čo tie, ktoré majú opačnú fázu sú urýchlené. Týmto spôsobom dochádza k

postupnému usporiadaniu elektrónov v objeme celého mraku (obr. 5), ktorý sa už následne správa koherentne a intenzita žiarenia takéhoto objektu je o niekoľko rádov vyššia ako pôvodného, pred vstupom do undulátora.



Obr. 4: Schematicky znázornená undulátorová časť. Modrá čiara reprezentuje trajektóriu elektrónov a žltá trajektóriu vznikajúceho RTG žiarenia [1].



Obr. 5: Znáznornenie postupného usporiadania elektrónov v jednom mraku prostredníctvom SASE efektu do tvaru diskov, medzi ktorými je vzdialenosť jednej vlnovej dĺžky [1].

Zber dát sa bude robiť na desiatich rôznych laboratórnych stanovištiach. Precíznosť diagnostiky žiarenia a náročnosť spracovania a analýzy získaných dát snád' nie je nutné popisovať. Za zmienku stojí fakt, že na pilotnom programe FLASH predstavoval dátový tok okolo 100 MB/s. Pre projekt XFEL sa predpokladá náročnosť dátového zaťaženia až 300 MB/s.

#### 4. Čo nám XFEL prinesie vo všeobecnosti

Na základe predbežných experimentov na pilotnom zariadení FLASH sa už dnes dajú predikovať nesmierne dosahy XFELu na rôzne vedné disciplíny. Najväčší prínos sa samozrejme predpokladá vo fyzike a jej odvetviach, predovšetkým vo fyzike tuhých látok a fyzike plazmy. Nemaľý rozvoj môže zažiť aj chémia. Vďaka žiareniu s dobou pulzu pod 100 fs bude po prvý krát možné priamo sledovať chemické procesy, napr. reakciu dvoch samostatných molekúl. Prevratné objavy môžeme očakávať v oblasti biológie. Prvý krát v histórii ľudstva bude možné aspoň po dobu jedného pulzu priamo sledovať žijúcu bunku organizmov. Rovnaký pokrok nastane aj pri štúdiu vírusov, alebo molekulárnych komplexov bez potreby ich kryštalizácie. S tým je úzko spätý rozvoj farmakológie smerom k účinnejším liečivám a zdokonaľovanie medicínskych metodík a zákrokov. Veľké rozšírenie poznatkov predpokladá aj genetika. Budeme môcť spoznať skutočný tvar DNA reťazca. Spomenúť treba aj elektroinžinierstvo, predovšetkým optoelektroniku. Už teraz sa počíta s XFELom pri vývoji nových slnečných kolektorov, alebo nových typov prenosných batérii. To sú len niektoré vedné disciplíny, pre ktoré bude XFEL mimoriadnym prínosom.

Okrem toho sa vytvoria možnosti na uplatnenie nie len fyzikov, matematikov, ale aj informatikov, elektroinžinierov, optoinžinierov, stavebných inžinierov, či hutníkov. Odhaduje sa, že ročne má viac než 500 vedcov zo Slovenskej Republiky reálny predpoklad zapojiť sa priamo alebo nepriamo do nosných tém Európskej Únie opierajúcich sa o technické možnosti XFELu. Nie sú to však len vedeckí pracovníci, ktorí z toho budú profitovať. Do úvahy treba brať príležitosti pre desiatky slovenských podnikateľov, ktorí

by boli schopní dodávať rôzne konštrukčné prvky alebo poskytovať stavebné a ostatné inžinierske práce počas výstavby urýchľovača.

Nemožno zabudnúť ani na obchodnú stránku zapojenia Slovenskej Republiky do tohto projektu. V prípade patentovania alebo predaja výskumu získava totiž každá krajina finančný profit z takejto transakcie, ktorý je rovný percentuálnemu investičnému podielu.

#### 5. Význam pre materiálové inžinierstvo

Pre materiálové inžinierstvo bude predstavovať XFEL výskumný nástroj doposiaľ nedosiahnuteľných možností. Otvárajú sa tak dvere pre dokonalejšie RTG difrakčné techniky, sledovanie fázových transformácií, presnejšie spektroskopické metódy, fázové analýzy, lepšie zviditeľnenie subštruktúry, alebo výskum nanoštrukturovaných a nanočasticových materiálov, a pod.. To všetko samozrejme na atomárnej úrovni a metódou in – situ. Zároveň však treba jedným dychom dodať, že všetky možnosti, ktoré budú XFELom poskytované, sa ešte zatiaľ nedajú odhadnúť. Z už známych prínosov pre materiálové inžinierstvo možno spomenúť aspoň niektoré:

**RTG difrakcia** – Pulzy extrémne tvrdého RTG žiarenia produkovaného XFELom budú približne 1000 krát kratšie a budú obsahovať 100 krát viac fotónov, než je tomu u dnešných synchrotrónov. Na základe týchto ukazovateľov môžeme v prípade XFELu hovoriť už o femtosekundových difrakčných technikách, ktoré vždy boli nedosiahnuteľným snom pre vedu. Konečne budeme môcť zachytiť a zaznamenať detailné informácie o rozvoji štruktúr rôznych materiálov, taktiež

procesy, ktoré sa odohrávajú na medziatómovej úrovni, ultrakrátke excitované stavy, a pod. Vďaka okamžitému konvertovaniu difrakčného záznamu na reálny 3D obrazový záznam budeme mať jasnú predstavu o tom, ako a čo v pozorovanej vzorke skutočne prebieha. Femtosekundová difrakcia sa tak stane revolučnou technikou spoznávania. K tomu je treba pripočítať výhodu použitia masívnejších vzoriek na štandardné RTG difrakčné analýzy ako doposiaľ. Naznačuje to menšia vlnová dĺžka a väčšia energia žiarenia.

**RTG holografia** – Najlepšie zariadenia súčasnosti pre túto techniku sú schopné zobrazovať útvary a častice s minimálnou veľkosťou 50 nm. Predpokladom u XFELu budú častice s rozmerom okolo 1 nm. To napomôže k odhaleniu alebo potvrdeniu niektorých magnetických charakteristík materiálov, napríklad antiferomagnetizmu. S väčšou presnosťou a jemnosťou môžeme tiež očakávať zobrazovanie magnetických domén.

**Nanomateriály** – Kam až budú siahť príspevky XFELu v tejto oblasti je dnes ťažko predikovať. Zatiaľ je však isté to, že na rozdiel od súčasného poznávania vlastností nanočastíc, kedy musíme vychádzať z kolektívneho prejavu ich veľkej skupiny, po novom si budeme môcť dovoliť študovať len jednu nanočasticu samostatne. V jednej nanočastici tak môžeme spoznať presné rozloženie atómov v objeme, stupeň ich usporiadania, kryštalografiu alebo iné štrukturálne charakteristiky. Taktiež budeme môcť študovať jej fyzikálne, prípadne iné vlastnosti. Zaujímavé bude aj štúdium adsorpčných javov rôznych organických molekúl na povrchu nanočastíc. V súčasnosti nemožný hlbší výskum tzv. *Quantum Dots* štruktúr zažije vďaka

XFELu výrazný pokrok. Jedná sa hlavne o polovodičové materiály s využitím v počítačovej mikroelektronike. Súčasná transmisná elektrónová a rastrovací tunelovací mikroskopia sú pre svoj deštruktívny účinok voči týmto vzorkám na tento účel nepoužiteľné.

**Spektroskopické metódy** – Príspevok XFELu ku spektroskopickým metódam spočíva v zdokonalení RTG fotónovej korelačnej spektroskopie, ako nástroja na štúdium nanorozmerových dynamických systémov. Zdokonalenie tejto metodiky XFELom spočíva v posunutí „citlivosti“ na vlnové dĺžky pod 10 nm a frekvencie až  $10^{13}$  Hz. Budeme mať možnosť sledovať dynamiku atómov pri prechode skiel z taveniny do tuhej fázy. Podobne aj pri kryštalizácii kovov. V oblasti fonónovej spektroskopie bude možné zostaviť mapy náhodných termálnych fluktuácii štruktúr. Taktiež je predpoklad možnosti zaznamenať dynamiku silných akustických fonónov (zatiaľ len extrémne silných). Cez metódu fonónovej spektroskopie bude umožnený výskum povrchových štruktúr a javov kvapalných kovov (ortuť), alebo tavenín iných kovov.

**3D štruktúrna charakterizácia** – monochromatické žiarenie XFELu nám umožní študovať a vizualizovať rôzne častice materiálov metódou mikrotomografie, či dokonca až nanotomografie. Častice alebo fázy sa budú dať zobrazovať trojrozmerné a v aktuálnej objemovej distribúcii. V prípade potreby bude možné aj súčasne zobrazenie kvalitatívne rôznorodých častíc, napriek tomu, že majú rozdielny absorbný koeficient. Do úvahy pripadá aj tomografia využívajúca efekt absorbných hrán atómov, čím sa môžu zviditeľniť len vybrané častice bez rušivých vplyvov rôznych artefaktov [3].

**Dynamické procesy** – Hlavne v tejto oblasti výskumu materiálov sa očakávajú významné objavy a značné rozšírenie súčasných poznatkov. Vďaka malouhlovému rozptylu RTG žiarenia bude možné sledovať in – situ také procesy ako spekanie práškov, rezanie materiálov, procesy tvorby dutín, pórov a rozmanitých štruktúr pri zváraní. Konečne bude možné odpovedať na otázku, ako sa v skutočnosti tvoria zložité dislokačné štruktúry z jednotlivých dislokácií, ako sa realizuje pohyb dislokácií, vakancií, chýb vrstvenia a čo všetko nastáva pri deformácii zrn polykryštálu. Dokonca aj tak rýchle procesy ako sú rozvoj a šírenie krehkého lomu, či deformácia materiálov tlakovými vlnami budú pozorovateľné v reálnom čase. Veľké očakávania sú v oblasti fázových transformácií. Po prvý krát bude možné priamo sledovať a zaznamenať nukleáciu martenzitu, bainitu, alebo iných štruktúr. Takisto iniciačné procesy rekryštalizácie, segregácie alebo precipitácie. Ohrevom alebo ochladzovaním sa dajú nasimulovať podmienky tepelného spracovania materiálov a pozorovať pri tom nukleáciu a rast zrn, tvorbu textúry a hyperštruktúr alebo difúziu jednotlivých komponentov. Navyše, s XFELom sa otvára nový spôsob manipulácie s materiálmi, tzv. fotoindukcia fázových transformácií s možnosťou ultrarýchleho prechodu z jednej fázy na druhú a späť. Nie sú tu však obmedzenia iba na fázové transformácie v tuhom stave. Obsiahnuté budú aj skupenské premeny látok.

**Fázová analýza** – Už synchrotróny tretej generácie s veľkým nárastom prekonávali všetky ostatné techniky detekcie a identifikácie fáz v tuhých látkach, vrátane často používanej elektrónovej mikroskopie. Nie je preto prekvapením, že XFELovské žiarenie ovplyvní aj túto oblasť výskumu materiálov a ešte

mohutnejšie pozdvihne pomyselnú latku nastavenú synchrotrónmi predchádzajúcej generácie.

**Analýza napät'ových polí** – Vďaka nízkej absorpcii vysokoenergetických fotónov bude možné „presvietiť“ väčšiu hrúbku materiálu a pomocou difrakčných techník, ktoré poznáme budeme môcť vykonať napät'ovú analýzu po celom objeme vzorky. Sledovať bude možné aj rozvoj napät'ových oblastí, napr. pri deformácii, fázových transformáciách, zváraní alebo creepe materiálov.

**Trenie** – Ak chceme pochopiť skutočnú podstatu trenia a opotrebovania materiálov s tým spojeného, musíme porozumieť tomuto princípu na atomárnej úrovni. Taktiež interakcia materiálu s mazivom môže byť pomerne chýlostivá. Rozhodujúce procesy sa v týchto prípadoch odohrávajú v objemoch niekoľkých desiatok atómových rovín. Súčasné zdroje však nie sú dostatočne citlivé na to, aby zaznamenali počiatky a pravé príčiny týchto javov. Umožní nám to až XFEL [4].

Väčšinu z experimentálnych techník bude možné vykonávať aj za neštandardných podmienok. Aplikovateľné budú vysoké alebo nízke teploty, ohrev alebo ochladzovanie vzorky počas pozorovania alebo vysoké tlaky na úrovni GPa. Tiež môžeme počítať so štúdiom vzoriek v elektromagnetických alebo magnetických poliach.

## 6. Záver

Projekt XFEL je jeden z najväčších projektov Európskej únie. Po svojom dokončení a úspešnom spustení bude XFEL svetovo unikátne zariadenie pre špičkový vedecký výskum pri maximálnom rozlíšení a intenzitách. Bez

preháňania sa dá povedať, že XFEL bude najvýkonnejší a najflexibilnejší mikroskop na svete, ktorý posunie hranice ľudského poznania o niekoľko krokov vpred.

Samotné zariadenie je síce ešte len vo výstavbe, avšak je rozumné už teraz pripravovať výskumné projekty a vypracovať ich tak, aby ich bolo možné s úspechom prihlásiť do súťaže na pridelenie pracovného času. Pri rozhodovaní o udelení pracovného času bude komisia prihliadať skôr na zameranie, kvalitu, perspektívu a prínos projektu pre vedu a výskum, než na percentuálne zastúpenie krajiny v rozpočte XFELu. Kontaktné osoby pre Slovenskú Republiku budú mim. prof. RNDr. Pavol Sovák, CSc. z Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach a Ing. Karel Saksl, PhD. z Ústavu materiálového výskumu Slovenskej akadémie vied taktiež v Košiciach.

### **Použitá literatúra**

[1] [www.xfel.eu](http://www.xfel.eu)

[2] XFEL – Technical Design Report, DESY, 2006, NSR.

[3] REIMERS W. et al.: Neutrons and Synchrotron radiation in engineering materials science. Wiley-vch, Darmstadt, 2008, ISBN 978-3-527-31533-8.

[4] SAKSL K.: Zdroj žiarenia budúcnosti. In Quark. September 2005.