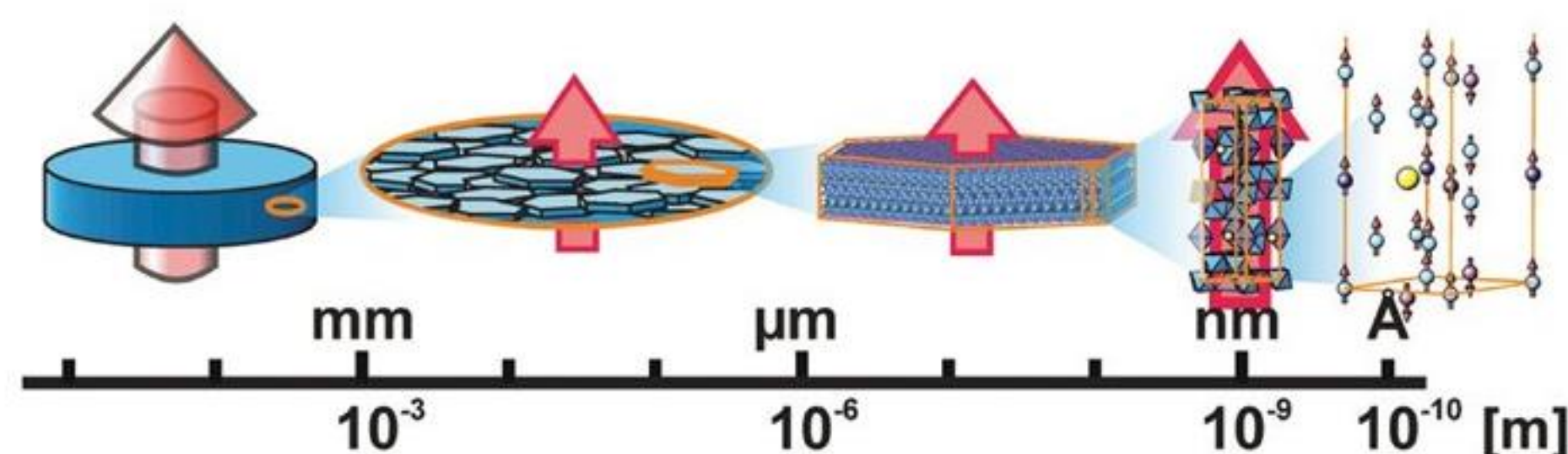


Kemi ved European Spallation Source (ESS)

Materialeforskningens CERN – i Lund.

Af Niels Bech Christensen, Institut for Fysik, Danmarks Tekniske Universitet og Mogens Christensen, Institut for Kemi, Aarhus Universitet

I Lund er byggeriet af den europæiske neutronforskningsfacilitet ESS netop gået i gang. Af den samlede anlægspris på 13,8 mia. kr. bidrager Danmark som medvært med 1,7 mia. kr. Det gør ESS til den største enkeltstående danske forskningssatsning i moderne tid. Vi beskriver her i korte træk, hvad neutronforskning er, og hvordan ESS fungerer. Med udgangspunkt i det dansk-schweiziske instrument HEIMDAL giver vi derpå et glimt af nogle af de kemiske gennembrud, som ESS vil kunne give anledning til, når de første neutroner produceres i 2019.



Figur 1. Magnetiske materialer over mange længdeskalaer – fra centimeter til ångstrømskala ($\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$). For at kunne lave gode magneter skal alle de viste længdeskalaer undersøges og kontrolleres. Fra højre mod venstre, atomar skala, nanometerskala og mikrometerskala.

Hvad er neutron-spredning?

Da Clifford G. Shull og Bertram N. Brockhouse i 1994 blev tildelt Nobel-prisen i fysik for deres udvikling af neutroddiffraktion og neutronspektroskopi, udtalte Nobelpriskomiteen, at Shull og Brockhouses opdagelser muliggør undersøgelser af, hvor atomer er, og hvad atomer gør [1].

Mere konkret fungerer det således: Neutroner vekselvirker med atomkerner og med elektronernes magnetiske momenter og de trænger pga. deres elektriske neutralitet let igennem de fleste materialer. Når neutroner med bølglængder i Ångstrøm-området (10^{-10} m) sendes ind på prøver, hvor atomernes indbyrdes afstand er af samme størrelsesorden, kan konstruktiv interferens af de spredte neutroner observeres. I krystallinske materialer ses interferensen i form af strukturelle og magnetiske Bragg-toppe, mens biomolekyler i opløsning giver anledning til mindre strukturerede diffraktionsmønstre.

Ved at undersøge vinkelfordelingen af de spredte neutroner, opnår man et unikt fingeraftryk af en prøves struktur. Hastighedsfordelingen af neutronerne, som forlader prøven, giver information om energiniveauer i prøven. Energierne er bestemt af styrken af bindingerne, der holder materialer sammen, og af de elektromagnetiske vekselvirkninger, der er ansvarlige for f.eks. magnetisme. Dermed kan man grave et spadestik dybere og ikke blot forstå, hvor atomerne er, men også hvorfor de befinder sig, hvor de gør. Endelig kan den strukturelle og dynamiske information fra neutron-eksperimenter kombineres med prøvens

biologiske, fysiske eller kemiske egenskaber, hvorved forskere kan forstå sammenhængen mellem struktur og funktion og dermed designe bedre materialer.

Hvad er ESS?

Traditionelt produceres neutroner til materialeforskning via fission i dedikerede atomreaktorer. Nyere neutronfaciliteter såsom ESS er derimod baseret på en kernefysisk proces, kaldet spallation, der ikke er behæftet med de samme sikkerhedsrisici. Spallation fungerer ved at accelerere pulser af protoner op til hastigheder nær lysets og derpå lade dem kollidere med et såkaldt target bestående af et tungt grundstof.

ESS vil anvende wolfram som target, som protonpulserne vil ramme 14 gange i sekundet. Hver neutronpuls varer 2.86 ms. Dette er betragteligt længere end verdens øvrige spallationskilder og en væsentlig grund til, at ESS bliver verdens førende facilitet.

Atomkernerne i target eksiteres voldsomt af protonpulsen, og udsender neutroner med meget høj hastighed. Før de kan anvendes til studier af materialer skal disse neutroner nedbremses, så deres bølglængder når Ångstrøm-området. Dette sker i en såkaldt moderator via kollisioner med lette grundstoffer.

Når ESS er fuldt udbygget, vil der være 22 instrumenter dedikeret til undersøgelser af specifikke materiale-egenskaber lige fra fysik og kemi til biologi, biokemi og ingeniørvidenskab. Danske og schweiziske forskere har samarbejdet om at udvikle innovative instrumentkoncepter til ESS, og tre af disse er nu udvalgt til konstruktion.

De nye instrumentkoncepter kombineret med forbedringer i accelerator-, target- og moderatorteknologier giver ESS gain-

■ ESS i tal

Konstruktionen af ESS vil i alt koste 13,8 mia. kr. Heraf bidrager Sverige som værtsland med 35%, mens Danmark som medvært lægger 12,5%, svarende til cirka 1,7 mia. kr. Det gør ESS til den største danske forskningssatsning i nyere tid. De resterende 52,5% af anlægsomkostningerne betales af de 15 europæiske medlemslande.

Efter planen bliver de første neutroner produceret i 2019, og ESS skal stå fuldt operationsklart i 2025. Det forventes, at ESS vil have ca. 500 fastansatte og at flere tusinde forskere fra hele verden hvert år vil gæste de eksperimentelle faciliteter i Lund, samt ESS' Data Management of Software Center (DMSC) i København. DMSC vil have ca. 60 fastansatte medarbejdere og har ansvaret for processerings- og analysesoftware til de enorme datamængder, der dagligt vil blive produceret i Lund [2].



Her skal ESS bygges.

faktorer på mellem 30 og 1.000 i forhold til de bedste instrumenter i verden. Populært sagt kan ESS-instrumenter måle mellem 30 og 1.000 gange hurtigere, så en måling der i dag tager en time, på ESS vil kunne foretages på under to minutter. Med sådanne forbedringer vil ESS revolutionere materialeforskning i bred forstand og være stærkt medvirkende til at løfte vigtige samfundsudfordringer inden for avancerede materialer til energi- og bioteknologi. Med reference til partikel-fysikkens mekka er det derfor ingen tilsnigelse at hævde, at ESS bliver materialeforskningens CERN!

Kemi på ESS

Vi går nu over til at beskrive eksempler på de mange specifikke kemiske problemstillinger, som ESS vil give afgørende ny information om. Vi tager konkret udgangspunkt i instrumentet HEIMDAL, som er udviklet i et samarbejde mellem Aarhus Universitet, Københavns Universitet og Paul Scherrer Institutet i Schweiz. Ved som noget unikt at kombinere klassisk neutron-diffraktion med småvinkelsspredning og imaging kan HEIMDAL undersøge strukturer på længdeskalaer imellem 0.01 nm og 50 mm. Intervallet svarer til objekter på en længdeskala fra 1 meter op til afstanden til månen – altså ni størrelsesordener.

HEIMDAL udnytter flere af neutronspreddningens specielle styrker i forhold til røntgen-diffraktion, herunder at neutroner tydeligt ser lette elementer såsom H, Li og O, der er centrale for

detaljeret forståelse og forbedring af energilagringsteknologier såsom hydrogenlagring, Li-ion-batterier og brændselsceller.

Evnen til at foretage undersøgelser på mange længdeskalaer simultant vil blive kombineret med muligheden for at lave in situ- og in operando-forsøg. Det bliver med andre ord muligt at studere batterier under operationelle betingelser og observere Li-ionernes bevægelse under af- og opladning. Studier af multi-skalastrukturer er også af interesse inden for heterogen katalyse og porøse netværk til transport af medicin.

In situ-forsøg på HEIMDAL med varierende temperatur, tryk, volumen eller kemisk sammensætning vil føre til nye gennembrud inden for materialesyntese, idet man vil kunne undersøge krystallisationsprocesser og herunder studere prækrystallinske faser og dermed identificere optimale syntesebetingelser. Dette er ikke blot af akademisk interesse, men kan have konkret økonomisk

SKANLAB

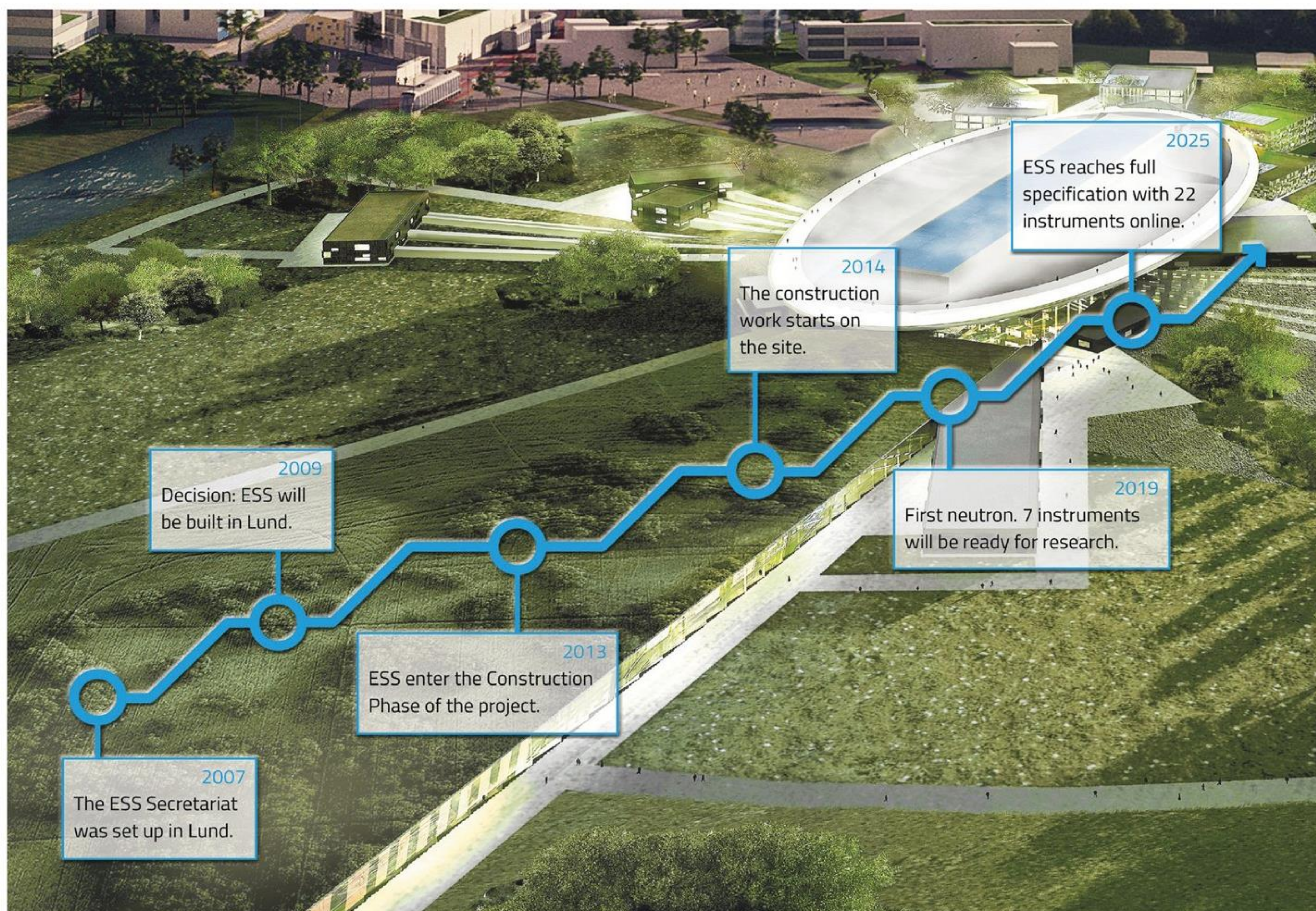


Solutions in Milling & Sieving



www.retsch.dk
birte@skanlab.com

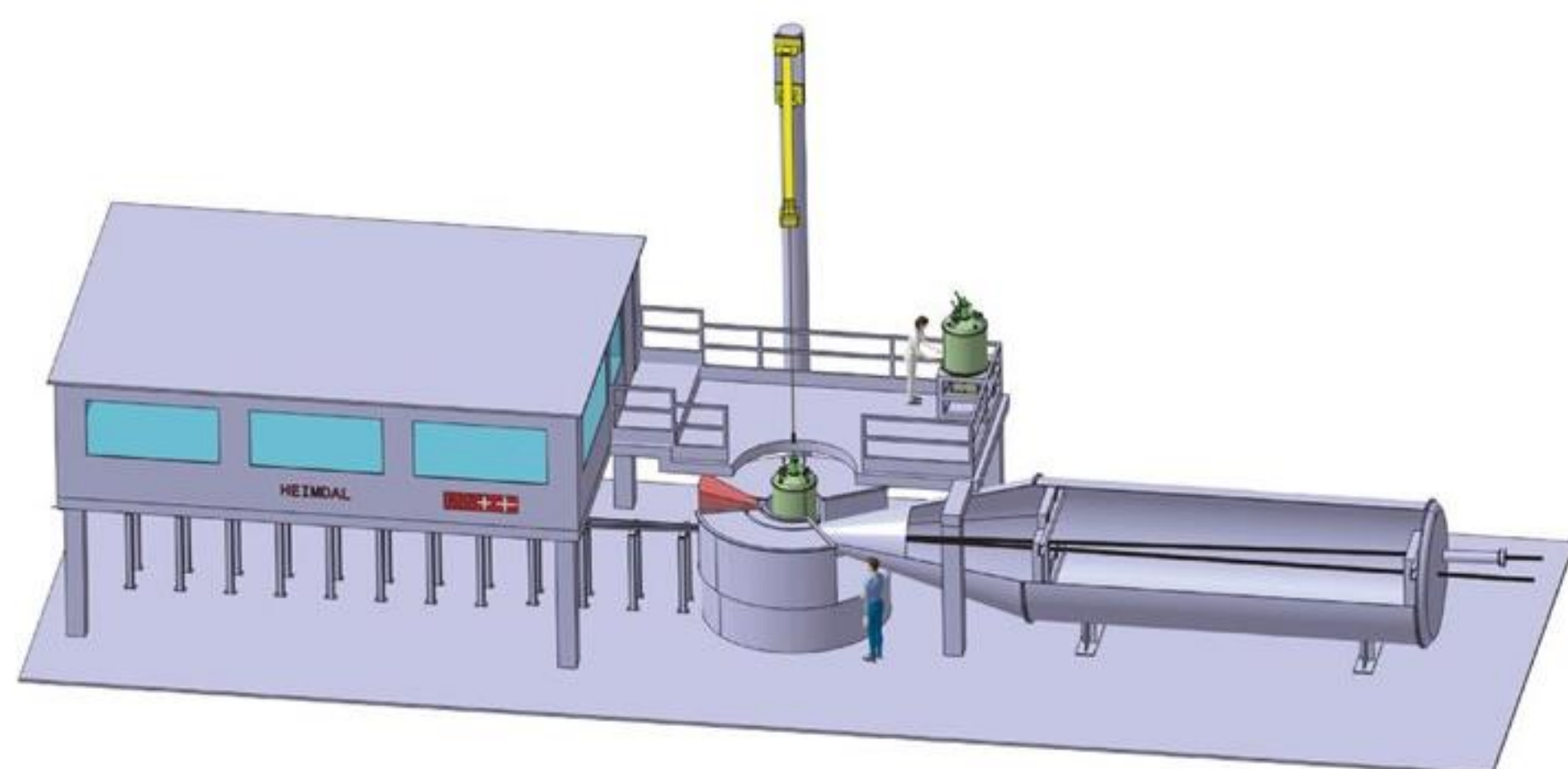




Tidsplanen for opbygning af ESS.

betydning, f.eks. via studier af cements størkningsproces eller u hensigtsmæssig nukleering af klathrat-hydrater i olie-rør. I begge tilfælde er det essentielt, at HEIMDAL har den fornødne neutronintensitet til at følge tidsudviklingen af strukturerne, hvorved kemiske processer der foregår en på 1 sekunds tidskala, kan "filmes".

Iblandt styrkeområderne finder vi også parametriske studier, hvor komplette fasediagrammer af nye materialer kan



Det er essentielt, at HEIMDAL har den fornødne neutronintensitet til at følge tidsudviklingen af strukturer, hvorved kemiske processer, der foregår på en 1 sekunds tidskala, kan "filmes".

bestemmes i løbet af et og samme eksperiment. HEIMDAL vil desuden være velegnet til studier af væsker og glas, fordi det er muligt at måle parfordelingsfunktionen, som tillader direkte observation af interatomare afstande i ikke-krystallinske materialer. Endelig vil HEIMDAL tillade dybere forståelse af

magnetiske materialer, hvor nye og forbedrede magneter kan fremstilles af magnetiske nanokompositter, figur 1.

Perspektiver med ESS

Udover HEIMDAL bygges der en lang række instrumenter til undersøgelse af kemiske forbindelser og materialer. I fokus er alt fra bestemmelse af hydrogenpositioner i proteinkrystallografi til ingeniørrelaterede instrumenter, som kan undersøge strukturelle ændringer under mekanisk påvirkning. Andre instrumenter vil kunne give information om atomernes vibrationer og magnetisk spindynamik, som er vigtige for at forstå termoelektrika og funktionelle magnetiske materialer. De 22 ESS-instrumenter vil hver især bidrage med ny viden inden for fysik, kemi, biokemi, biologi og mange andre naturvidenskabelige discipliner.

Udover verdens kraftigste neutronkilde, ESS, kommer Lund til at huse verdens kraftigste røntgen synkrotronkilde, MAX-IV [3].

Neutron- og røntgenspredningsteknikker er komplementære og de to nabofaciliteter vil findes lige på den anden side af Øresund, til stor gavn for akademisk og industriel forskning og udvikling i Danmark.

E-mail:

Niels Bech Christensen: nbch@fysik.dtu.dk

Mogens Christensen: mch@chem.au.dk

Referencer

1. www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1994/press.html
2. <http://europeanspallationsource.se/>
3. www.maxlab.lu.se/maxiv