

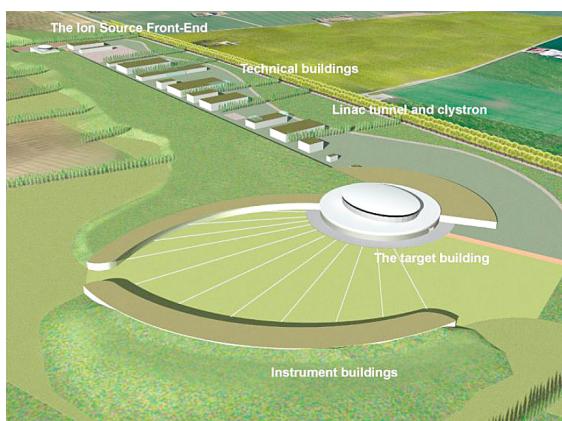
ESS: En forskningsfacilitet i verdensklasse under opbygning i Lund

Af Kim Lefmann, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet og European Spallation Source, Lund, Sverige, Lise Arleth, Institut for Grundvidenskab og Miljø, Fakultet for Biovidenskab, Københavns Universitet, Niels Bech Christensen, Afdeling for Materialeforskning, Risø-DTU, Søren Pape Møller, ISA, Institut for Fysik og Astronomi, Aarhus Universitet, Stig Skelboe, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet og European Spallation Source, Lund, Sverige og Peter Kjær Willendrup, Afdeling for Materialeforskning, Risø-DTU

European Spallation Source (ESS) bliver en fælles-Europæisk forskningsfacilitet til undersøgelse af materialer ved hjælp af spredning af langsomme neutroner. Den vil blive meget (10-100 gange) mere effektiv end tilsvarende anlæg i Europa, Japan (J-PARC) og USA (SNS). Den vil derfor blive verdens førende neutronfacilitet, som kan ventes brugt af 2000-4000 forskere hvert år inden for mange discipliner af teknik og naturvidenskab. En tegning af ESS faciliteten er vist på Figur 1.

1. ESS og MAX-IV

Neutronspreddning har, sammen med røntgenspreddning, igennem et halvt århundrede været en af de væsentligste teknikker til undersøgelse af atomar struktur og andre egenskaber af hårde, bløde, og biologiske materialer. Traditionelt har man brugt neutroner produceret i reaktorer optimeret til forskningsformål. Den førende facilitet af denne type, Institut Laue-Langevin (ILL) i Grenoble (F) [1], blev taget i brug i 1970.



Figur 1. Skitse af ESS. Længden af acceleratoren er ca. 400 m, og de længste neutronguides (hvide streger) er ca. 300 m.

Forslaget om et nyt fælles-europæisk ESS projekt er flere gange blevet lagt frem uden at blive vedtaget, men i maj 2009 lykkedes det endelig. På et sent aftenmøde mellem Europæiske forskningsministre stod valget mellem tre "finalister": Debrechen (H), Bilbao (E), og Lund (S). Efter en nervepirrende ventetid faldt valget på Lund; til stor begejstring for mange forskere, der fulgte live opdateringer på Sydsvenskan's hjemmeside. "Sejren" i konkurrencen blev muliggjort af et stort lobbyarbejde fra de skandinaviske forskningsmiljøer, kraftig opbakning fra landenes ministerier, og ikke mindst et utroligt dedikeret projektteam i Lund [2].

Finansieringen af byggeriet af ESS (ca. 1.5 mia. euro) dækkes med 50 % fra de skandinaviske lande

(12,5 % fra Danmark). Spanien har forpligtet sig til yderligere 10 % finansiering, og de resterende 40 % skal fordeles mellem de øvrige 12 medlemslande, især Tyskland og Frankrig, mens Storbritannien ikke forventes at blive medlem fra starten. Driftsudgifterne (knap 100 mio. euro/år) ventes fordelt nogenlunde efter BNP, omend Sverige som værtsland vil skulle betale en højere andel. Også Danmark kommer til at betale en smule mere – som medvært. Datacentret, der skal behandle de mange data fra ESS og forvandle dem til videnskab, kommer nemlig til at ligge i København.

Projektets videnskabelige aktualitet er på det seneste blevet forøget væsentligt, idet man i november 2010 påbegyndte bygningen af synkrotron-røntgenkilden, MAX-IV, på Brunnshög 4 km NØ for Lunds centrum, lige ved siden af grunden hvor ESS skal stå. MAX-IV vil blive af en kvalitet, der kan måle sig med de allerbedste røntgenkilder i verden [3]. Synergien mellem forskningsmiljøerne ved MAX-IV og ESS forventes at blive stor, da mange forskergrupper med fordel vil kunne anvende begge faciliteter.

Indtil starten af 2013 er ESS projektet i "design update" fasen, hvor projektet bliver færdiggjort i stor detalje. Herefter vil medlemslandenes regeringer beslutte at starte byggefasen. Forskningen ved ESS forventes at starte i 2019, mens hele faciliteten først forventes at være fuldt udbygget i 2025.

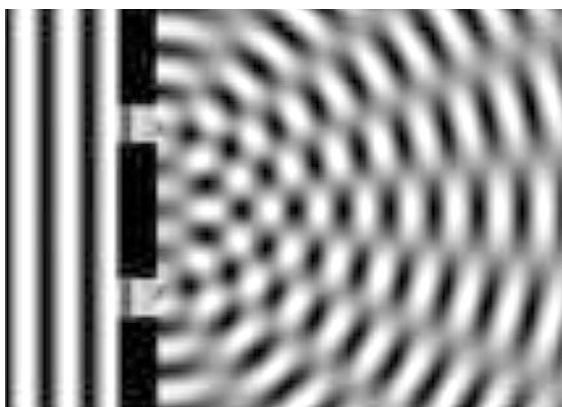
I denne artikel vil vi beskrive, hvilken forskning, man kan udføre med neutroner og med ESS, og især om det arbejde i design update fasen, som vi og andre danske forskere i øjeblikket er stærkt engageret i.

2. Fysikforskning med neutroner

Vi vil her først præsentere neutronspreddning generelt, og derefter komme med aktuelle eksempler fra forskning i faststoffysik og biofysik fra danske forskningsgrupper. For yderligere uddybning og eksempler skrevet på dansk vil vi henvise til et nyligt særnummer af KVANT om forskning med neutroner [4], samt [5]. Flere detaljer kan fås i lærebogsmateriale, f.eks. [6,7].

Neutronspreddning

Neutronen er en kernepartikel, der har omtrent samme masse som protonen, men som er uden elektrisk ladning. Som andre partikler af atomar størrelse har den fremherskende bølge- såvel som partikelegenskaber. Neutroner, der bevæger sig med en vis hastighed, v , opfører sig således, ifølge DeBroglies relation, præcis som en bølge med bølgelængden $\lambda = h/mv$, hvor h er Planck's konstant og m er neutronens hvilemasse. Neutroner, der anvendes til spredning, vil typisk have en hastighed, der svarer til bølgelængder i intervallet fra 1 Å til 40 Å. Disse bølgelængder er sammenlignelige med typiske afstande mellem atomer, hvilket gør det muligt at benytte neutronerne til at undersøge, hvordan et bestemt stof ser ud på atomar skala; se figur 2. Grundet deres manglende ladning er neutroner meget gennemtrængende. Dette betyder at de, ligesom røntgen-stråling, er gode til at "se ind i" stof. Modsat fotonerne i røntgen-stråling, har neutronerne et magnetisk moment. Det betyder, at de både er følsomme overfor rumlig molekyler struktur og rumlig magnetisk struktur, hvilket gør dem særdeles anvendelige til at studere fænomener, der involverer magnetisme.



Figur 2. Billede af en bølge, der passerer igennem to huller, og derefter udviser interferenseffekter. En "neutronbølge", der rammer to atomer vil spredes på samme måde.

Neutroner har den specielle egenskab, at de vekselvirker stort set lige kraftigt med de fleste isotoper af grundstofferne. Dog vil hydrogen, ^1H , skille sig markant ud ved at vekselvirke meget stærkt med neutronerne. Det betyder, at neutroner vil se en stærk kontrast mellem hydrogen-rige og hydrogen-fattige områder af en prøve. Herimod vil røntgenstråling vekselvirke med elektronerne i en prøve, og derved se kontrast mellem de elektron-rige og elektron-fattige dele af en prøve. Dette vil stort set svare til de dele med henholdsvis høj og lav massefylde. De to kontrast-situationer betyder, at neutroner og røntgen komplementerer hinanden på smukkeste vis. Nogle dele af prøven træder tydeligt frem i neutroneksperimentet mens andre dele træder mere tydeligt frem i røntgeneksperimentet. Tilsammen kan man få dannet et meget præcist billede af prøvens struktur.

Den kinetiske energi af neutronen kan beregnes ud fra $E = \frac{1}{2}mv^2$. Det viser sig, at de nævnte neutroner

med bølgelængder fra 1 Å til 40 Å har en energi (80 meV til 0,05 meV), der svarer meget godt til den energi, der skal til for at sætte et krystal-gitter i svingninger. Som det bliver beskrevet i næste kapitel udnyttes dette sammenfald til at måle, hvordan atomerne i et stof bevæger sig.

I forbindelse med strukturundersøgelser betragtes både neutroner og røntgen normalt som prober, der i udgangspunktet ikke ødelægger prøvens struktur. Man "gennemlyser" blot prøven med enten neutron- eller røntgen-strålingen og kan derefter, i princippet, tage den uskadte prøve ud af beamet.

Dansk neutronspreddning i 2011

Danmark har en stolt tradition for neutronspreddning, ikke mindst på grund af faciliteten på DR3 reaktoren på Risø, som blev lukket i 2000 [4]. De fleste af Risø tidligere neutroneksperter er nu flyttet til andre steder i landet og har opbygget store og små grupper. I alt er der i dag lidt over 100 forskere i Danmark, der aktivt benytter neutronspreddning til forskning. Disse forskere er organiseret i brugergruppen DANSSK [8].

To af instrumenterne fra DR3 blev flyttet til Schweiz; til Paul Scherrer Institutet (PSI) [4,9], med hvilket vi har opbygget et tæt samarbejde. Vi har således i lange perioder haft to post docs udstationeret, og vi har samfinansieret adskillige danske ph.d.-studenter, der har udført en del af deres projekt på PSI. Igennem dette samarbejde har Danmark fast adgang til nogle af PSI instrumenterne, hvor adgang ellers vil ske gennem et ansøgningssystem, hvor kun udvalgte forslag bliver tildelt måletid.

Dansk forskning med neutroner og synkrotron-røntgenstråling er naturligvis hæmmet af, at der ikke er nationale faciliteter; dog har vi i Århus synkrotron-faciliteten ASTRID og snart ASTRID2, som genererer ultraviolet stråling og blød røntgenstråling [10]. Derfor har man oprettet det nationale instrumentcenter DANSCATT [11], som dækker rejseudgifter til eksperimenter til alle danske brugere af neutron- og hård røntgenstråling.

For få år siden blev Danmark prøvemedlem af ILL, på linie med de fleste andre europæiske lande. Dette har givet danske forskere en utrolig god mulighed for at være med i front og benytte de absolut bedste instrumenter. Adskillige danske grupper har allerede benyttet sig af muligheden og har fået særdeles spændende resultater. Vi håber derfor, at der findes finansiering til at sikre dansk medlemskab af ILL i perioden indtil ESS står klar.

Eksempler fra faststoffysik

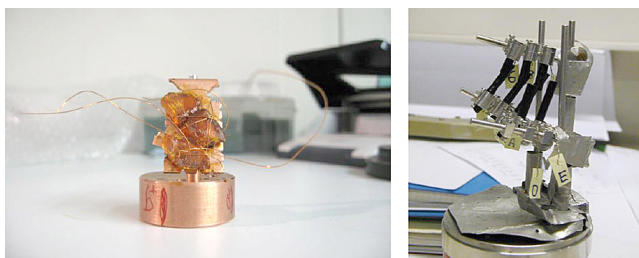
Neutronspreddning har længe været en vigtig teknik i fundamentale studier af faste stoffers fysik, og bidrog bl.a. med de første direkte målinger af antiferromagnetisk struktur, magnetisk dynamik (spinbølger), samt gittervibrationer. I det følgende vil vi give to eksempler på brug af neutronspreddning i moderne faststof- og

materialefysik. Eksemplerne har det til fælles, at de omhandler materialer af interesse for energi-sektoren.

En neutron kan sætte en krystal i svingninger ved at afgive energi til prøven. Alternativt kan den optage energi fra en krystal, som allerede svinger. Tilsvarende kan neutroner via deres magnetiske vekselvirkning med elektroner skabe eller optage svingninger i de magnetiske momenter i en prøve. Nogle neutroninstrumenter er specialiseret i at måle forskellen i neutronens energi før og efter den rammer prøven. Flere danske grupper udnytter allerede i dag denne type instrumenter.

Som eksempel har en dansk gruppe under ledelse af forskere fra Kemisk Institut ved Århus Universitet foretaget et detaljeret studium af gittervibrationer i den termoelektriske halvleder $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$. Som beskrevet tidligere i KVANT [4] er det essentielle element af materialets krystalstruktur nano-hulrum i en Ga-Ge "værts-matrix", hvori der kan inkorporeres "gæsteanioner" af Barium. Ved elegante eksperimenter lykkedes det forskerne at eftervise en teoretisk forudsigelse af, at de akustiske svingningers dispersion $\omega_{\text{ak}}(q)$ (dvs svingningernes frekvens som funktion af bølgetallet) ikke krydser gæsteanionernes dispersion $\omega_{\text{gst}}(q)$. Dette resultat har forbedret forståelsen af mekanismen bag den termoelektriske effekt i denne type materialer.

Et andet eksempel er studier af de *magnetoelektriske* Li-orthofosfater LiMPO_4 , hvor M er et metalatom: Mn, Fe, Co, Ni. LiFePO_4 anvendes i dag som katode-materiale i batteri-industrien, men dets magnetiske egenskaber er væsentlig mindre komplekse end LiNiPO_4 . En Risø-DTU baseret gruppe har ført an i studier af magnetiske strukturer og spinbølger i LiNiPO_4 under høje magnetfelter. Derudover er der udviklet en model, som beskriver hvordan magnetfeltet ved lave temperaturer drejer de atomare magnetiske momenter, hvilket tillader LiNiPO_4 at vinde magnetisk vekselvirkningsenergi via en forskydning af ionerne. Derved opnås samtidig en makroskopisk elektrisk polarisation, som kan give anledning til et elektrisk signal.



Figur 3. Typiske prøver (krystaller) til uelastiske neutroneksperimenter i dag. Venstre: To ravfarvede krystaller af en lav-dimensionel kobber-kloridbaseret antiferromagnet, som undersøges for at få nærmere indblik i detaljerne i mange-partikel kvantemekanik; den cylindriske fod er 25 mm i diameter. Højre: 8 sorte krystaller af $(\text{La}, \text{Sr})_2\text{CuO}_4$, som undersøges for at forstå sammenhængen mellem magnetisme og høj-temperatur superledning; hver krystal er ca. 20 mm lang.

Fælles for de ovenfor beskrevne forskningsprojekter er, at de har krævet ugevis af beamtid på det danske byggede tre-akse spektrometer RITA-II på PSI. I tilfældet $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ var dette nødvendigt til trods for, at

krystallen var så stor som 13 gram. Figur 3 viser nogle typiske neutronprøver. På ESS vil uelastiske forsøg kunne udføres betragteligt hurtigere – på få timer – eller med væsentligt mindre prøver. Det sidste er en tungvejende grund til at bygge ESS. Det er nemlig undertagelsen snarere end reglen, at det er muligt at gro store en-krystaller af materialer af teknologisk og grundvidenskabelig interesse. Ved at udvide denne flaskehals forkorter ESS vejen til banebrydende nye indsigter og teknologi; for eksempel det længe søgte gennembrud i forståelsen af de gådefulde høj-temperatur superledere.

Eksempler fra Biofysik

Biologiske systemer indeholder typisk meget hydrogen. Den markante forskel i neutronens vekselvirkning med ^1H og ^2H gjorde allerede i 1970'erne neutronspreddning til en vigtig metode til at undersøge biologisk inspirerede systemer samt til at undersøge syntetiske materialer som polymerer (plastik). I et klassisk forsøg har man blandet en lille smule polymer-kæde hvor alle ^1H 'er var udskiftet med ^2H 'er ind i en polymer-smelte bestående af almindeligt ^1H -polymer. Dermed "farvede" man reelt enkelte polymerer i smelten, hvilket åbnede op for en langt bedre forståelse af en stor gruppe af materialer, der har central betydning i det moderne liv.

Kontrastforskellen mellem ^1H og ^2H kan også benyttes til at se på komplekse biologiske systemer, som fx cellemembraner, der typisk består af en blanding af et lipid-dobbeltlag og en lang række associerede membranproteiner. Disse er enten blot hæftet til membranen eller danner kanaler, der kan transportere specifikke stoffer gennem membranen. Membranproteiner spiller en central rolle både indenfor biologisk og farmaceutisk forskning, således virker mere end halvdelen af alle medicinske stoffer i kraft af deres vekselvirkning med en lille gruppe af membranproteiner.

Membranproteiner har vist sig at være notorisk svære at krystallisere. Det betyder at røntgenbaseret protein-krystallografi, som ellers har givet banebrydende strukturel information om mange tusinder af de vandopløselige proteiner, ikke har kunnet bidrage i det ønskede omfang til undersøgelser af membranproteinerne.

Her kommer neutronspreddning og muligheden for at "lege" med kontrastsituationen ind i billedet. Hvis man undersøger et membranprotein, der sidder i en cellemembran, er det muligt systematisk at skrue op og ned for de forskellige dele af signalet, sådan at informationen om proteinstrukturen træder særligt tydeligt frem. Dette gøres i praksis ved at justere $^1\text{H}/^2\text{H}$ balancen i lipid dobbeltlaget, så laget får samme kontrast som den vandige buffer, som cellemembran + membranprotein svømmer rundt i. For at komplettere billedet kan man derefter justere $^1\text{H}/^2\text{H}$ -balancen i den vandige buffer, så bufferen får samme kontrast som membranproteinet. Dette gør det muligt at observere lipidmembranens struktur, mens der sidder membranproteiner i, men uden at blive forstyrret af selve membranproteinerne. Ved at stykke de forskellige bidder af information sammen, kan man ende med at få et ret detaljeret billede af celle-

membransystemet. Desværre ikke helt så detaljeret som det billede man får frem med protein-krystallografi, men til gengæld skal man heller ikke kæmpe med at krystallisere prøven.

I Øresundsregionen har vi allerede en meget stærk tradition indenfor Bioteknologi og Life Sciences med stærke og veletablerede samarbejder mellem universiteter og farmaceutiske virksomheder. Dette er et stærkt aktiv i forhold til ESS og i forhold til at sikre at ESS kommer til at gøre mest mulig gavn indenfor hele bio- og medico-området. Neutronbaserede undersøgelser betragtes dog stadig som temmelig eksotisk blandt de fleste biologer, farmaceuter og medicinere. Derfor skal der foregå en faglig modning af hele det forskningsfelt, der ligger i grænseområdet mellem fysik og biologi, hvis ESS skal kunne indfri sit store potentiale indenfor biovidenskaberne.

3. Dansk deltagelse i planlægningen af ESS

ESS bliver en spallationskilde, hvor neutronerne dannes ved at beskyde et "target" af et tungt grundstof med højenergetiske protoner fra en kraftfuld 400 m lang accelerator. Neutronerne modereres af flydende vand (300 K) eller brint (25 K), og opnår derved de ønskede hastigheder. Herfra sendes neutronerne gennem neutronreflekterende spejlkanaler ("guides") hen til de instrumenter, hvor neutronerne spredes på materialeprøven, og derefter registreres af de opstillede detektorer. Til sidst analyseres eksperimentets meget store datamængder (op til mange terabytes dagligt) af kraftige computere. Danske forskere er stærkt involverede i designet af ESS indenfor accelerator, instrumenter, og selvfølgelig dataanalyse og management. Den danske deltagelse i dette designarbejde bliver finansieret af Forsknings og Innovationsstyrelsen og indgår i det samlede danske bidrag til ESS. Nedenfor kommer vi nærmere ind på designarbejdet, og kommer herved på en lille rundtur under motorhjelmen på ESS.

Accelerator

Spallationskilder har været brugt i mange år, men middelintensiteten har ikke kunnet konkurrere med reaktorer. Dette har man kompenseret for ved at bruge pulserede ionstråler, så man ved hjælp af flyvetidsteknikker har kunnet udnytte neutronerne langt bedre end dem fra en reaktor. En yderligere fordel ved at bruge spallationskilder, sammenlignet med reaktorer, er den meget reducerede mængde radioaktivt materiale, der

bliver produceret.

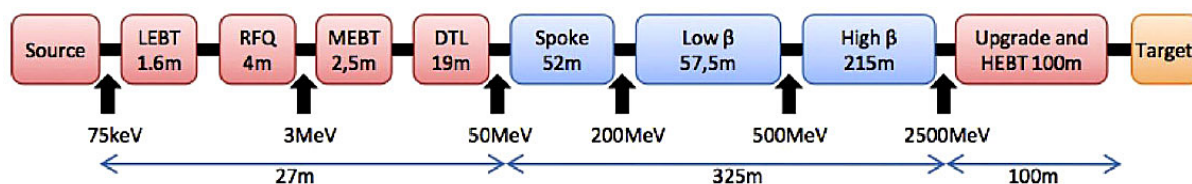
Den førende pulserede neutronkilde har i mange år været ISIS i UK, hvor korte pulser af 800 MeV protoner har produceret neutroner fra et W-target [12]. Antallet af neutroner er stort set proportionalt med effekten af protonstrålen, som for ISIS er 160 kW. Denne kilde kan til mange formål konkurrere med 58 MW reaktoren på ILL [1].

For få år siden blev SNS (Spallation Neutron Source) i USA taget i drift. Denne kilde producerer korte neutronpulser, 10-100 μ s, og med en rekord middelfekt på 1,4 MW [13]. PSI er verdens mest intense kontinuerle spallations-neutronkilde med en effekt på 1 MW [9]. Det er besluttet at bygge ESS som en facilitet til lange neutronpulser, hvor 1-2 ms lange pulser produceres 10-20 gange i sekundet af en protonstråle med en middelfekt på 5 MW.

Designopgaven består nu i at bygge en accelerator med ovenstående specifikationer billigst muligt med minimalt effektforbrug, høj pålidelighed og adskillige andre krav. Flere af disse parametre hører også sammen med design af target. Det er nu besluttet at anvende en protonstråle med en energi på 2,5 GeV. Dette giver for den ønskede puls-struktur en protonstrøm på 50 mA. Et andet væsentligt krav til acceleratoren er at minimere tabet af protoner i acceleratoren, således at acceleratoren kan serviceres og repareres med et lavt strålingsniveau (minimal induceret radioaktivitet). Dette medfører, at tabet af strålen må være under 1 W/m, svarende til relativt tab på under 10^{-7} /m. Dette er en stor design udfordring.

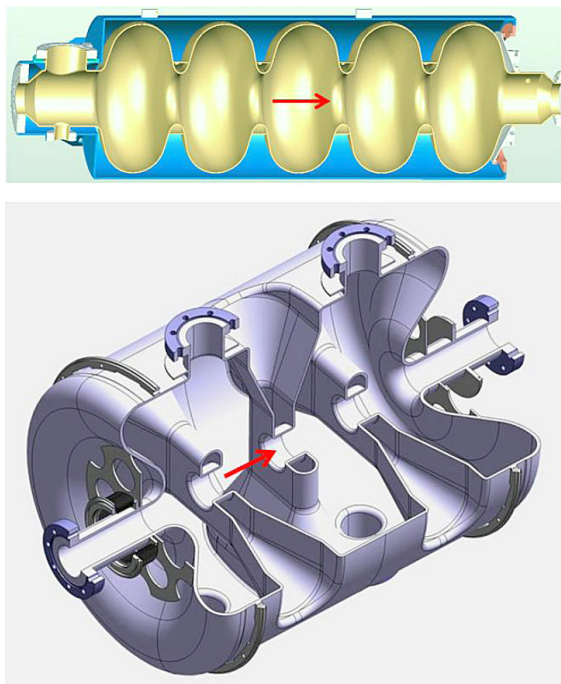
Valget af accelerator er faldet på en serie af lineære radiofrekvens (rf) accelerators. De accelererende felter genereres ved at sende radiobølger ved enten 352 eller 704 MHz ind i såkaldte kaviteter (hulrumsresonatorer). Valget af disse frekvenser betyder også, at selve protonstrålen vil være bundtet, altså have en mikrotidsstruktur.

Skematisk er acceleratoren vist i Figur 4. En ionkilde producerer en 50 mA protonstråle, der transporteres gennem et kort strålerør (LEBT) ind i en radiofrekvens-quadrupolaccelerator (RFQ), der både accelererer strålen til 3 MeV og holder strålen fokuseret uden brug af magneter. Via yderligere en kort stråletransport (MEBT) sendes strålen ind i en Drift-Tube-Linac, hvor den accelereres til 50 MeV. Disse accelerationer foretages med kaviteter ved stuetemperatur, medens de efterfølgende accelerationer, hvor langt den største energi tilføres, bruger superledende teknologi.



Figur 4. Principskitse af de enkelte komponenter i ESS acceleratoren. For nærmere beskrivelse, se tekst.

Der anvendes såkaldte “spoke” og elliptiske kaviteter, som er illustreret i figur 5. Kaviteterne er bygget af metallet niobium, der er superledende ved temperaturer under 9 K. Herved kan meget høje accelerationsfelter genereres uden væsentligt tab. Selvom den nødvendige teknologi er meget dyr og teknologisk krævende er dette den eneste måde, hvorpå den lineære accelerator kan bygges uden at blive alt for lang. Til slut transporteres strålen gennem en højenergi stråletransport (HEBT) de cirka 100 meter til target. HEBT skal udover selve stråletransporten indeholde plads til mulige fremtidige opgraderinger. Yderligere skal selve strålen kollimeres og der skal opbygges en “beamdump”, der benyttes til daglig indkøring af acceleratoren.



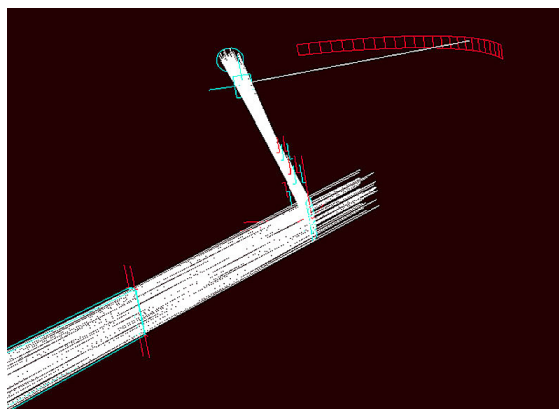
Figur 5. To typer af superledende kaviteter til ESS. Protonerne accelereres i et accelerationsgab. De røde pile angiver det accelererende elektriske felt i en af cellerne i begge typer kaviteter.

De ansvarlige partnere for arbejdsplanerne i design update af acceleratoren er ESS i Lund samt TEKNIKER i Bilbao, CEA og CNRS i Paris, INFN i Catania, Uppsala Universitet og Aarhus Universitet. Ved udgangen af 2012 vil konceptuelle planer for al hardware være færdige. Desuden skal prototyper af kritiske komponenter udformes og bygges. I løbet af 2011-2012 oprettes en såkaldt Plan-to-Build gruppe, der sammen med ESS i Lund vil videreføre design og opbygning af faciliteten. Den væsentligste investering i opbygningen af ESS acceleratoren vil være de mange kryostater med superledende accelerationskaviteter og de dertil hørende højeffekts rf generatorer (“modulatorer” og “klystroner”).

Det danske bidrag til design af ESS acceleratoren er HEBT. Udover at designe og optimere denne del af maskinen til de stillede krav skal vi designe alle komponenter konceptuelt, specielt de mange magneter med tilhørende strømforsyninger.

Simulering af instrumenter

Eksisterende pulserede neutronkilder opererer med korte pulser, 10-100 μ s. Dette giver automatisk en præcis bestemmelse af neutronernes bølgelængde, men ikke noget imponerende antal producerede neutroner. For at producere langt flere neutroner end på de eksisterende anlæg bliver ESS en lang-pulset kilde, med pulser på 1-2 ms varighed. Dette betyder store udfordringer for designet af instrumenterne ved ESS, for at usikkerheden på bestemmelsen af bølgelængden stadig bliver acceptabel. Man kan sige, at i forhold til instrumentdesign betræder vi med ESS ukendt territorium.



Figur 6. Illustration af typisk simulering af neutronsprædning med McStas. Hvide streger repræsenterer simulerede neutroner, men røde og blå figurer illustrerer optiske komponenter i instrumentet. Neutronerne kommer ind i bunden af billedet til venstre, reflekterer fra en krystal, og rammer prøven lidt over midten af billedet. Kun en enkelt neutron bliver faktisk spredt fra prøven og havner i den bananformede detektor.

Ved design af instrumenter har Danmark et særligt forspring, da vi udvikler McStas, en softwarepakke for simulering af neutroninstrumenter [14]. Her simuleres neutroner i hovedsagen som partikler med kendt hastighed, sted og tid med en metode kaldet ray-tracing, der også er kendt fra computergrafik, og som er illustreret i Figur 6. I en række af de aktive optiske elementer i instrumenterne, f.eks. spejle, krystaller og de virtuelle materialeprøver, bliver neutronerne derimod behandlet som bølger. Danske grupper har udviklet McStas siden 1996. Pakken har de seneste 6-8 år været verdens de facto standard og er bl.a. brugt til simulering af instrumenterne ved de nye spallations-neutronkilder J-PARC [15] og SNS [13]. På grund af dette, og på grund af placeringen af ESS Data Management og Software Center i Danmark, er vi blevet udvalgt til at lede opgaven med computersimulering af instrumenter til ESS.

Det er en stor opgave bare at danne sig et overblik over instrumentparken ved ESS. Instrumenter til krystallografi kræver langt bedre opløsning end den, man bruger til studier af magnetisme, og målinger af diffusion kræver bedre energiopløsning end instrumenter til studier af gittervibrationer. Dette medfører forskellige valg af neutronernes bølgelængde, instrumentets længde, og flere andre designparametre. Omkring 30 forskellige instrumenter har været på tale, hvoraf vi

p.t. har lavet indledende simuleringer og optimeringer af de 16. Generelt kan man sige, at på grund af de lange pulser bliver ESS instrumenterne meget længere, end dem vi kender fra de eksisterende spallationskilder, for at mindske den relative usikkerhed på flyvetiden. Mange instrumenter vil være 100-180 m lange, og enkelte op til 300 m. Dette stiller store krav til de neutronguides, der i analogi med lyslederkabler vil føre neutronerne frem gennem instrumentet. Mange af vores simuleringer har været fokuseret på netop neutronguides, og vores optimerede løsninger ser ud til at kunne virke stort set uden tab.

Den forholdsvis lange tid imellem pulserne på ESS, sammenlignet med eksisterende spallationskilder, giver også udfordringer. For at udnytte neutronerne bedst muligt har det været foreslået at bruge flere forskellige bølglængdeområder fra samme puls. Dette vil give et større antal neutroner på prøven, men vil også komplicere eksperimentet. En del af vore fremtidige simuleringer vil dreje sig om at afprøve disse muligheder, og især i samarbejde med Data Management og Software Centret at se, om det er muligt at analysere sådanne kombinerede data på en fornuftig måde.

De foreløbige resultater af simuleringerne er meget opløftende. For de fleste spektrometre vil vi få forøgelse i den brugbare neutronintensitet på 100-300 gange i forhold til de bedste eksisterende instrumenter. Denne store gevinst kan ses som en kombination af en kraftigere kilde og forbedret instrumentdesign. ESS vil også være optimalt til studiet af spredning og refleksioner ved små vinkler, altså til studiet af biologiske prøver, med gevinstfaktorer på 30-100. Derimod bevirker de lange pulser, at ESS ikke vil være helt optimal til studier af atomar struktur med høj opløsning. Her er vores nuværende instrumentdesigns "kun" på niveau med de bedste instrumenter i verden. Vi vil derfor give denne type instrumenter ekstra opmærksomhed i den kommende tid, og nye utraditionelle designs vil blive afprøvet.

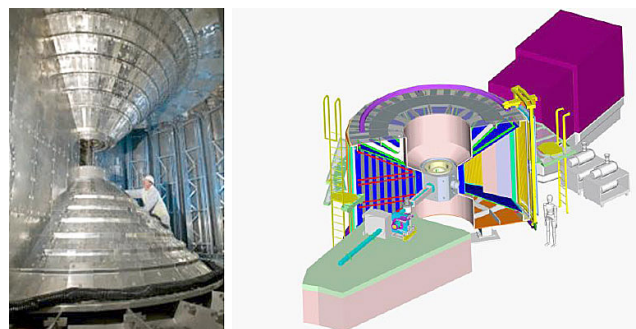
Instrumentsimuleringer benyttes også som input til design af accelerator og target/moderator. Den seneste tid har vi brugt på at simulere neutroninstrumenterne for 20 forskellige kombinationer af pulslængde og pulsfrekvens. I kombination med viden om acceleratordesign vil vores data kunne fortælle, på hvilken måde acceleratoren bedst kan anvendes. Ligeledes kan vi fortælle, hvor meget vi vil vinde, hvis neutronerne kan udsendes fra et centralt område på moderatoren i stedet for jævnt fordelt over hele overfladen. Dette har ført til et studie af nye moderatorgeometrier, som muligvis vil kunne give 100 % ekstra performance af ESS.

Konstruktion af instrumenter

Efter planen vil ESS ved opstarten i 2019 have omkring 7 instrumenter, som dem der er vist på figur 7. Herefter vil der løbende blive bygget flere. Den oprindelige tanke var at det endelige ESS i 2025 ville have 22 instrumenter, men det er i løbet af design update fasen blevet klart, at det vil være muligt bygge op imod 30-40 instrumenter, og dermed opnå et højere videnskabeligt

udbytte.

Der foreligger endnu ingen beslutninger om hvilke instrumenter, der vil blive bygget, eller hvilke, der skal bygges først. Simuleringerne giver et klart billede af hver enkelt instrumenttypes performance sammenlignet med de bedste eksisterende og planlagte instrumenter på andre neutronfaciliteter, såsom ILL, SNS og J-PARC. I beslutningsprocessen vil disse tal blive afvejet imod behovet i de akademiske og industrielle bruger-samfund. Det er derfor sandsynligt, at ESS i 2025 vil kunne tilbyde en instrumentpark, der er komplet i den forstand at den indeholder samtlige "klassiske" instrumenter til studier af atomare og molekylære (f.eks. biologiske) strukturer, til studier af dynamik i stoffer samt til gennemlysning ("imaging"). Derudover er der lagt op til, at der vil være plads til nye instrumenttyper, udviklet specielt til ESS.



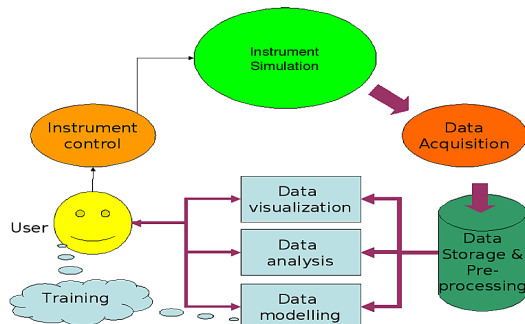
Figur 7. Eksempler på neutronspektrometre ved spallationskilden ISIS. (venstre) foto fra detektorkammeret på spektrometret LET. (højre) Principskitse af spektrometret MERLIN – den blå streg er neutronguiden, den overskårede cylinder er detektoren, og den lille kasse er et "beam stop", som opfanger neutroner, der ikke blev spredt.

De danske neutronspreedere har besluttet at indgå i samarbejde med vore kolleger på PSI om deltagelse i konstruktion af et eller flere – endnu uspecificerede – instrumenter til ESS. I forbindelse med dette samarbejde, er dansk tilstedeværelse på PSI af stor vigtighed, idet vi herved får direkte adgang til test af nye ideer på denne neutronkilde. I skrivende stund er ESS i fuld gang med at ansætte erfarne neutronspreedere, som vil få overordnet ansvar for opbygningen af instrumenterne, dog i første omgang for tilknytning af rådgivende ekspertgrupper. Et hovedmål for det dansk-schweiziske samarbejde vil være at blive repræsenteret i disse grupper og at få tildelt opgaven med detail-design af et eller flere instrumenter i den sidste del af design-update fasen.

Data Management og Software Center

Opsamling, lagring og analyse af data fra ESS vil foregå på Data Management og Software Centret (DMSC), som vil være en del af selve ESS organisationen og kommer til at ligge ved den kommende Niels Bohr Science Park i København. Fuldt udbygget er det planen, at DMSC skal have ca. 60 medarbejdere. Med dette antal skulle det blive muligt at indfri de ret høje ambitioner, der er med hensyn til omfang og kvalitet af den service, som DMSC kan tilbyde.

DMSC skal kunne tilbyde de bedste forhold for ekspertbrugere samtidig med at ikke-eksperter tilbydes halvautomatisk analyseprogrammer samt hjælp og vejledning fra DMSC. På denne måde skulle det blive muligt for ikke-eksperter og virksomheder at udnytte en væsentlig del af instrumenterne og analysemulighederne på ESS næsten eller helt uden hjælp fra specialister på universiteterne.



Figur 8. Oversigt over de væsentligste funktioner på ESS-Data Management og Software Center, illustreret i forbindelse med test af systemet ved simuleringer.

På figur 8 ses en oversigt over de væsentligste funktioner på DMSC. Under udførelsen af et eksperiment vil funktionen "Instrument Simulation" være erstattet af "Instrument". Det betyder, at datalagring og analyseprogrammer på DMSC kan benyttes på næsten samme måde uafhængigt af, om der opsamles data fra instrumenterne eller data genereres af et simuleringsprogram. Simuleringsfaciliteterne benyttes både til test af instrumenter og programmer, til undervisningsbrug og til planlægning af målinger. Formålet med det sidste er at sikre, at måletiden på ESS bliver udnyttet optimalt.

Funktionen "Data Acquisition" består i opsamling af måledata fra et instrument. I praksis vil dette være registrering af hver enkelt neutron i detektoren: dens placering og tidspunktet for registreringen. Denne såkaldte event-mode registrering vinder stigende udbredelse og vil blive brugt i de fleste instrumenter. Den stiller store krav til opsamlingshastighed og lagringskapacitet, men muliggør til gengæld mere fleksibel dataanalyse end den traditionelle histogrammetode.

Data opsamles i Lund, hvor de lagres, inden de sendes til København. Denne første lagring giver dels en sikkerhed mod at miste data og giver dels en udjævning af trafikken over netforbindelsen til København. For nogle instrumenters vedkommende vil det være muligt at lave en løbende analyse af data, så det er muligt at overvåge, om eksperimentet forløber tilfredsstillende.

Datalagringen ved DMSC skal tilgodese mange krav. Lagringen skal være sikker, både hvad angår sikkerhed mod tab og sikkerhed mod tilgang fra uvedkommende. Det sidste er især vigtigt for brugere fra erhvervslivet. Desuden skal der tilbydes fleksibel adgang over nettet, så brugere kan arbejde med deres data, hvor det er mest hensigtsmæssigt. Dette gælder både data og analyseprogrammer.

Til brug for dataanalysen skal der bruges et antal forskellige programmer, dels generelle programmer til forbehandling af data og dels specielle programmer til

analyse af data fra hver hovedgruppe af instrumenter. Der bliver sikkert også behov for analyseprogrammer, der er specifikke for de enkelte instrumenter.

Som nævnt ovenfor findes der allerede et antal spalationsfaciliteter. Disse faciliteter har software centre i lighed med DMSC, og dermed også programmer af den type, som skal bruges til ESS. En stor del af dette findes i public domain og vil umiddelbart kunne udnyttes. Der vil være behov for at udvikle programmer specielt til ESS, som dog delvist vil være af interesse for andre neutronfaciliteter. Planen er derfor at etablere samarbejde mellem neutronfaciliteter med henblik på at udnytte og udvikle programmer. Der er etableret en indledende kontakt med ISIS, der sammen med SNS har udviklingsprojektet Mantid af programmer til dataanalyse. Vi forventer, at vort første bidrag til Mantid vil være integration af funktionalitet fra McStas simuleringspakken, i samarbejde med McStas gruppen på DTU-Risø og KU.

4. Forberedelser til fremtiden

Efter 20 års diskussion er det endelig lykkedes at tage beslutning om at bygge ESS. Endda lige på den anden side af Øresund med Danmark som medvært. Det er noget af en appelsin at få i sin turban, men det forpligter også. Vi må som forskere yde vores absolut bedste for at være med til at sikre projektets fremdrift. 2025 lyder som meget langt ude i fremtiden, men som man kan læse i artiklen, er det seriøse arbejde allerede godt i gang, og der er vigtige tidsfrister at overholde.

Hvis ESS og MAX-IV lever op til de høje forventninger, vil Øresundsregionen indenfor de næste 10-15 år have mulighed for at blive verdens førende indenfor forskning i mange typer materialer, inklusive biologiske systemer. Dette vil give meget store muligheder for forskningen; både for de eksisterende miljøer og for muligheden for at kunne starte helt nye aktiviteter. Nye forskere søger nemlig allerede nu fra hele verden mod Skåne og Danmark for at arbejde for og med ESS og MAX-IV. Dette vil også på længere sigt give forbedrede muligheder for den del af erhvervslivet, der baserer sig på den nyeste viden indenfor disse forskningsområder; f.eks. medicinalindustrien.

Et nyt dansk-svensk samarbejde, kaldet "Øresund Material Innovation Community", er netop opbygget med det formål at sprede viden blandt forskere og studerende, samt udvikle samarbejde om, hvad ESS og MAX-IV kan anvendes til [16].

ESS har slået sig op som en bæredygtig forskningsfacilitet, og der vil blive stillet store krav til minimering af energiforbrug, genanvendelse af energi til f.eks. opvarmning, samt kompensation for det betydelige elektricitetsforbrug ved medfinansiering af havvindmøller. Det forventes at en sådan udvikling vil give et forspring indenfor energivenlige teknologier ved fremtidige projekter, noget som mange underleverandører vil kunne nyde godt af. I øvrigt vil der også med ESS være enestående muligheder for dansk og svensk industri til at udvikle og levere de mange højteknologi-

ske komponenter, der skal bruges til opbygningen af en acceleratorbaseret neutronkilde.

Men til en start vil vi glæde os over, at projektet nu er sat i gang, og vi ser frem til selv at kunne tage del i forberedelserne. Og så vil vi glæde os til de fantastiske forskningsmuligheder, der faktisk starter allerede i indeværende årti.

Litteratur

- [1] <http://www.ill.eu>
- [2] <http://www.ess-scandinavia.eu>
- [3] <http://www.maxlab.lu.se/maxlab/max4/index.html>
- [4] KVANT **18** (2) (Maj 2007); særnummer om neutronspreddning
- [5] K. Lefmann, L. Arleth, K. Mortensen, B. Lebech, *Naturens Verden* 1/2003
- [6] G.C. Squires: *Thermal Neutron Scattering*, Cambridge University Press 1978
- [7] K. Lefmann: *Neutron Scattering, Theory, Instrumentation, and Simulation*, kursusnoter (189 sider), Niels Bohr Institutet 2010
- [8] <http://www.danssk.dk>
- [9] <http://www.psi.ch>
- [10] <http://www.isa.au.dk>
- [11] <http://www.danscatt.dk>
- [12] <http://www.isis.stfc.ac.uk>
- [13] <http://neutrons.ornl.gov>
- [14] <http://www.mcstas.org>
- [15] <http://j-parc.jp/MatLife/en/index.html>
- [16] <http://www.oresund.org/materials/projects/oeresund-materials-innovation-community>



Kim Lefmann er lektor i neutronspreddning på Nanoscience Centret, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet. Han har tidligere arbejdet på DR3 på Risø og på et af de danske instrumenter på PSI, og har stået fadder til simuleringspakken McStas. Han har deltaget i arbejdet for ESS siden lobby-organisationen ESS-Scandinavia blev stiftet i efteråret 2000.



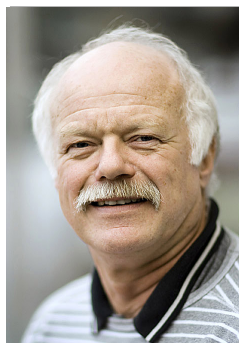
Lise Arleth er lektor i biofysik ved Institut for Grundvidenskab, Life Science Fakultet på Københavns Universitet. Hun forsker i struktur og vekselvirkninger af biomolekyler i opløsning. De primære måleteknikker er småvinkel neutronspreddning (SANS) og småvinkel Røntgenspreddning (SAXS) samt lysspreddning (DLS og SLS).



Niels Bech Christensen er seniorforsker ved Afdelingen for Materialeforskning på Risø DTU og interesserer sig for høj-temperatur superledning og lav-dimensionel kvantemagnetisme. Han har tidligere arbejdet som instrumentansvarlig på RITA-II spektrometeret på PSI i Schweiz, og koordinerer nu den danske instrumentkonstruktionsindsats i forhold til ESS.



Søren Pape Møller er ph.d. og dr. scient fra Aarhus Universitet, hvor han leder acceleratorcentret ISA med synkrotronstrålingskilden ASTRID. Han har deltaget i opbygningen af mange accelerators og er Work Package Leader i ESS Accelerator Design Update.



Stig Skelboe er professor ved Niels Bohr Institutet, hvor han forsker og underviser i metoder til videnskabelige beregninger. Siden september 2010 har han været projektleder for Data Management and Software Centret for ESS.



Peter K. Willendrup er cand. scient. i fysik fra Københavns Universitet. Han er siden 2002 teknisk projektansvarlig for McStas og ansat som udviklingsingeniør ved Afdelingen for Materialeforskning på Risø DTU.

PFEIFFER VACUUM

**Turbopumpe
HiPace™**



Ring for yderligere information

Tlf. 4352 3800 Fax 4352 3850
efa@pfeiffer-vacuum.dk