

Röntgenblitzlicht und Molekülkino

Am Röntgenlaser European XFEL hat der Forschungsbetrieb begonnen.

Alexander Pawlak

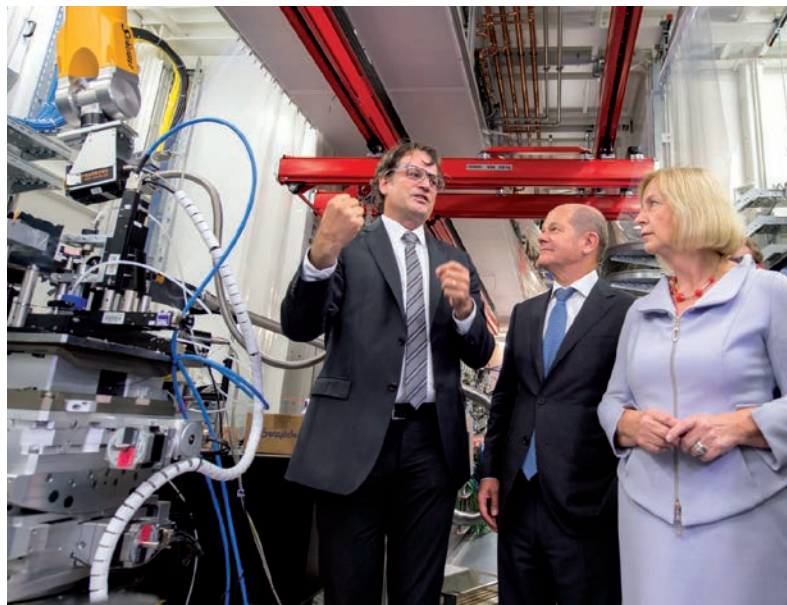
1) www.xfel.eu; Physik Journal, Juni 2017, S. 10 und November 2016, S. 7.

2) Centre for Ultrafast Imaging, vgl. Physik Journal, November 2013, S. 20

Viele Forscherinnen und Forscher aus aller Welt dürften es von nun an in ein schmuckloses Gewerbegebiet ins schleswig-holsteinische Schenefeld ziehen. Grund dafür sind nicht die dortigen Autowerkstätten, sondern der stärkste Röntgenlaser der Welt: der Europäische Freie-Elektronen-Röntgenlaser, kurz European XFEL.¹⁾ Oberirdisch ist davon nicht viel zu sehen, denn der Röntgenlaser erstreckt sich in einem Tunnel von 3,4 Kilometern Länge vom DESY in Hamburg bis zur Experimentierhalle unterhalb des modernen Hauptgebäudes der neuen Großforschungseinrichtung. Der European XFEL ist das weltweit leistungsfähigste Blitzlicht und die schnellste Hochgeschwindigkeitskamera für die Nanowelt. Er soll es ermöglichen, die Struktur komplexer Biomoleküle aufzuklären, chemische Reaktionen „in Echtzeit“ zu filmen oder extreme Materiezustände bzw. neuartige Werkstoffe zu untersuchen.

„Was vor über 20 Jahren als Vision bei DESY begann und auf den Weg gebracht wurde, ist heute Wirklichkeit“, freute sich Helmut Dosch, Vorsitzender des DESY-Direktoriums, beim offiziellen Start des Forschungsbetriebs am 1. September. Anwesend waren die Forschungsminister bzw. Vertreter aller elf Partnerländer, darunter

Der European XFEL verbindet die beiden Bundesländer Hamburg und Schleswig-Holstein.



Bilder: XFEL (2)

Christian Bressler (links), leitender Wissenschaftler am Experiment FXE, erklärt Hamburgs Erstem Bürgermeister und Bundesforschungsministerin Johanna Wanka das Prinzip des „Molekülkinos“.

Russland, Frankreich, Dänemark und die Schweiz. Großbritannien befindet sich im Beitrittsprozess. Nun können sich Forschergruppen aus aller Welt in einem Auswahlverfahren um „Strahlzeit“ am European XFEL bewerben – in der Regel ein bis zwei Wochen pro Gruppe und Experiment.

Ein solch komplexes Großgerät lässt sich nicht einfach anschalten; nach und nach galt es, Meilensteine zu meistern. Die supraleitende Beschleunigertechnik und die Erzeugung des Röntgenlaserlichtes (Info-

kasten) wurden am 315 Meter langen Freie-Elektronen-Laser FLASH am DESY getestet und stehen dort seit 2005 für die Forschung zur Verfügung. Der zehnmalfach längere European XFEL beschleunigt die Elektronen auf 17,5 GeV statt nur auf 1 GeV bei FLASH und kann mit einer deutlich kleineren minimalen Wellenlänge (0,05 nm statt 4,1 nm) bis in die atomaren Details von Molekülen vordringen. Das machte die Inbetriebnahme noch anspruchsvoller und zeitaufwändiger. Jeder Schritt, ob die Erzeugung der Elek-



tronen am Injektor beim DESY, ihre Beschleunigung im 1,7 Kilometer langen supraleitenden Linearbeschleuniger oder Führung und -anpassung der erzeugten Röntgenlaserstrahlung, geschieht an der Grenze des technisch Machbaren. Daher dauerte es vom ersten Röntgenstrahl am Ende des Tunnels am 27. Mai bis zum 23. Juni, bis die ersten Röntgenquanten die Experimentierhalle erreichten. Knapp eine Woche später ließ sich erstmals kohärente Röntgenbeugung demonstrieren. Anfang August bot eine DPG-Recherchereise einen ersten Einblick in die Messstationen, an denen die Stunde der Experimentatoren geschlagen hat – zunächst der für die Entwicklung und Betreuung zuständigen Forscher des European XFEL, die seit September mit den Gastwissenschaftlern eng zusammenarbeiten.

Leitender Wissenschaftler des „Femtosecond X-Ray Experiment“ (FXE) ist Christian Bressler, der auch federführendes Mitglied am Exzellenzcluster CUI ist.²⁾ „Wir möchten ultraschnelle Reaktionen untersuchen, wie sie in der Natur vorkommen“, sagt er, etwa solche, die bei der Infektion einer Zelle eine Rolle spielen. Am European XFEL soll sich in natürlicher, d. h. meist wässriger Umgebung nicht nur verfolgen lassen, wie sich die Positionen der Atome im Laufe der Reaktionen verändern, sondern auch, wie die elektronischen Kräfte wirken, welche die Strukturänderungen antreiben. Ein optischer

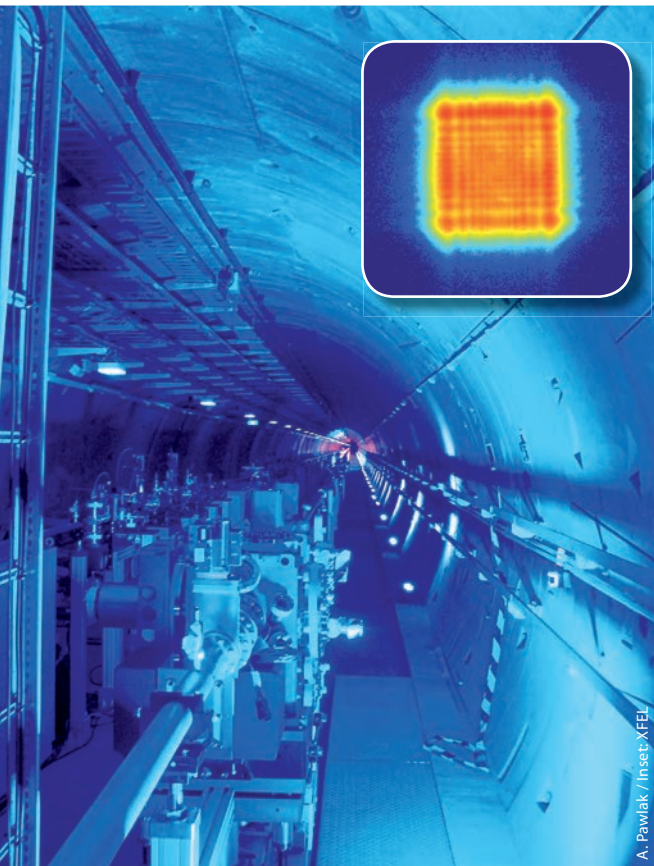
Hochleistungslaser startet die chemischen Reaktionen. Der Röntgenlaser dient dazu, in möglichst rascher Folge Beugungsbilder zu erzeugen, die von der „schnellsten Röntgenkamera auf diesem Planeten“ aufgenommen werden, wie Bressler stolz betont. Der LPD-Detektor (Large Pixel Detector), entwickelt vom European XFEL und dem Rutherford Appleton Laboratory bei Oxford, ist der erste voll funktionsfähige Röntgenlichtdetektor, der 4,5 Millionen Bilder pro Sekunde aufzeichnen kann – das ist schnell genug, um mit der hohen Wiederholrate des European XFEL in kürzesten Zeitabständen Schritt zu halten. Der Röntgenlaser kann 27 000 Pulse pro Sekunde erzeugen, 200-mal mehr als jeder andere Röntgenlaser auf der Welt. Die große Herausforderung, um mit dem Pump-Probe-Prinzip einen „Molekülfilm“ mit einer Zeitauflösung im Femtosekundenbereich aufzunehmen, liegt nicht zuletzt in der Synchronisierung von optischem Laser und Röntgenpulsen.

Wenn der Röntgenlaser die Proben bestrahlt, herrscht natürlich Zutrittsverbot im Experimentierraum, der nach außen hin durch einen Bleimantel abgeschirmt ist. „Alles, was wir während des Versuchs manipulieren wollen, müssen wir vom Kontrollraum aus fernsteuern“, erläutert Bressler. Das erklärt den leuchtend gelben Roboterarm und das Kabellabyrinth für die aufwändige Steuerungstechnik in der Experimentierkammer.

RÖNTGENLASER

Die beschleunigten Elektronen „rasen“ durch so genannte **Undulatoren**, spezielle Magnetanordnungen, welche die Teilchen auf einen engen Slalomkurs bringen. Dabei sendet jedes einzelne Elektron Röntgenlicht aus, das sich immer mehr verstärkt. Zur Verstärkung kommt es aufgrund der Wechselwirkung des Lichts mit den Elektronen: Da sich das Licht schneller ausbreitet als die auf einer Slalombahn fliegenden Elektronen, überholt das Licht die Teilchen und wirkt beim Vorbeifliegen auf die Elektronen ein. Einige Elektronen werden beschleunigt, andere abgebremst. Als Folge davon ordnen sich

die Elektronen in zahlreichen dünnen Scheiben an. Entscheidend ist dabei, dass sämtliche Elektronen in einer Scheibe im Gleichtakt strahlen. Dadurch entstehen extrem kurze und intensive Röntgenblitze mit den Eigenschaften von Laserlicht. Dies ist das **SASE-Prinzip – Self-Amplified Spontaneous Emission**, die selbstverstärkte spontane Emission. Die Scheiben sind dabei erst nach einer Weile im Undulator voll ausgebildet, sodass für Freielektronen-Laser sehr lange Undulatoren zum Einsatz kommen. Beim European XFEL erreichen sie eine Länge von über 100 Metern.



sehr eingeschränkt oder gar nicht. Am SPB/SFX geht es darum, die Molekülstruktur auch mit Kristallen, die für andere Anlagen zu klein sind, und im nächsten Schritt an einzelnen Molekülen zu bestimmen. Dafür gilt es, die Röntgenstrahlen auf Kristall- bzw. Molekülgröße zu fokussieren. Doch das ist bei Röntgenlicht nicht mit konventionellen Optiken möglich, sondern erfordert extrem flache Siliziumspiegel, die auf wenige Nanometer genau poliert sind. Das einkristalline Silizium dafür kommt aus Japan, wo es über Wochen und Monate poliert wird. An der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt wird die Qualität der Spiegel überprüft. Wenn alle Spiegel geliefert und getestet sind, werden Mancuso und sein Team den Röntgenstrahl auf 150 Nanometer fokussieren können, die relevante Größe für Biomoleküle.

Dabei ist das Vorgehen sehr brachial, denn der Röntgenpuls zerstört das zu untersuchende Molekül. Doch bevor es verpufft und abgesaugt wird, streut es einen Teil des Röntgenlichts, sodass ein Beugungsmuster entsteht. Aus vielen Beugungsmustern von unterschiedlich angeordneten Molekülen lässt sich die dreidimensionale Struktur des Moleküls berechnen. „Die Anwendungsmöglichkeiten sind enorm“, sagt Mancuso. So könnte es sogar möglich sein, atomare Details von Viren zu erkennen.

Ein dritter Messstand steckt noch mitten in den Vorbereitungen. In einem massiven Strahlenschutz-bunker aus Beton verbirgt sich unter einer Staubschutzplane eine große Aluminiumkammer, das Herzstück des Instruments HED (High Energy Density). Ab Ende 2018 soll es dort heiß hergehen: „Wir möchten Plasmaphysikexperimente durchführen, etwa um das Innere von Planeten und Sternatmosphären besser zu verstehen“, sagt der leitende Wissenschaftler Ulf Zastra, der nach seiner Habilitation an der Uni Jena zum European XFEL wechselte. Zwei der weltweit stärksten Laser werden Anfang 2018 auf dem Dach der HED-Kammer montiert, um die nötigen Drücke und Temperaturen

zu erzeugen. Stern- oder Planetenmaterie lässt sich dann in einem Volumen von wenigen Kubikmikrometern nachbilden und im Pump-Probe-Verfahren untersuchen.

Strahlende Zukunft

Angesichts der Komplexität und den enormen technischen Anforderungen erstaunt es, dass beim European XFEL Bauzeit und -kosten im Rahmen geblieben sind. Die größte Verzögerung von einem Jahr gab es durch Lieferschwierigkeiten bei den Beschleunigermodulen. Die Gesamtkosten betragen 1,2 Milliarden Euro, zehn Prozent mehr als geplant. Deutschland trägt als Sitzland mit 58 Prozent den Löwenanteil der Bau- und Betriebskosten, gefolgt von Russland mit 27 Prozent. Die anderen Partnerländer übernehmen zwischen einem und drei Prozent. Die Betriebskosten sind für 2018 mit rund 118 Millionen Euro veranschlagt. Bei der Vergabe der „Strahlzeit“ gibt es übrigens keine Länderquoten, etwa anhand des Anteils an der Finanzierung. Die Anträge externer Nutzer werden ausschließlich nach der wissenschaftlichen Exzellenz beurteilt.

Das Verhältnis von Deutschland und EU zu Russland mag auf dem politischen Parkett angespannt sein, in der Wissenschaft ist davon aber nichts zu spüren. „Die wissenschaftliche Zusammenarbeit klappt problemlos, und auch in Russland wird eine Nutzergemeinschaft aufgebaut“, sagt Robert Feidenhans'l. Der aus Dänemark stammende Physiker ist seit Anfang des Jahres Vorsitzender der Geschäftsführung der European XFEL GmbH.

Nun geht es darum, die Möglichkeiten der Anlage auszuschöpfen und zu erweitern. Die Experimentierhalle bietet noch viel Platz – zunächst vor allem für die Grundlagenforschung. Für die kommenden Jahre sind drei weitere Messplätze geplant, unter anderem für Nanopartikel sowie für funktionale und komplexe Materialien. Das, so hoffen die Betreiber des European XFEL, soll auch Nutzer aus der Industrie nach Schenefeld locken.

Der Blick in den (normalerweise nicht farbig illuminierten) letzten Teils des European XFEL. Das Röntgenlaserlicht wird von hier in die Experimentierhalle geführt, wo sich am 29. Juni 2017 erstmals Röntgenbeugung demonstrieren ließ (Inset).

Das zweite Experiment, das im September seinen Betrieb aufgenommen hat, hört auf das kryptische Kürzel SPB/SFX. Das steht für „Single Particles, Clusters, and Biomolecules & Serial Femtosecond Crystallography“. Leitender Wissenschaftler ist der Australier Adrian Mancuso. Den Physiker hat es vor zehn Jahren von Kalifornien nach Hamburg verschlagen, weil die Aussicht auf weltweit einmalige Experimentiermöglichkeiten lockte. „Ich bin nicht wegen des Wetters hier“, bekennt er schmunzelnd. Seine Arbeitsgruppe ist ein Musterbeispiel für die Internationalität von Forschung: Ihre Mitglieder stammen aus 16 Ländern von allen Kontinenten.

Die räumliche Struktur komplexer Moleküle wie Proteine geschieht bislang meist mit Kristallen, die man aus der verfügbaren Menge züchtet. Das gelingt jedoch bei vielen interessanten Biomolekülen, etwa den physiologisch wichtigen Membranproteinen, nur