

72 timer der kan oplyse verden

Et forskerholds forsøg på et japansk røntgenlaseranlæg kan i fremtiden føre til omdannelse af solens lys til kemisk energi. Ph.d.-studerende Asmus Ougaard Dohn skrev dagbog fra rejsen.

MOLEKYLER Alle rigtige kemikere drømmer om at kunne se molekylerne danse – at følge deres forandring under en kemisk reaktion. Hidtil har de kun kunnet drømme, men en ny type røntgenlaseranlæg har bragt dem et skridt nærmere målet: At kunne filme et molekyles forandring fra udgangspunkt til produkt. Ph.d.-studerende Asmus Ougaard Dohn fra DTU Kemi var i sommer med på en rejse til det store fri-elektronrøntgenlaseranlæg SACLA ved Osaka i Japan for at gøre drømmen til virkelighed.

Først for ganske nylig er det blevet muligt faktisk at "filme" hvad der sker i et molekyle, når det ændrer tilstand. De nye såkaldte fri-elektronrøntgenlaseranlæg, på engelsk forkortet til XFEL, kan ved hjælp af røntgenstråler tage billeder hurtigt nok til at optage det væld af forskellige processer, der finder sted i et molekyle, når en kemisk reaktion sættes i gang.

Det japanske røntgenlaseranlæg SACLA er blot det andet af sin art i verden - det første åbnede på Stanford University i USA for to år siden, og yderligere et bliver klar i Hamburg i 2014. Det koster op mod 100.000 kroner i timen at bruge sådan et anlæg, og forskerne har præcis 72 timers såkaldt "beamtid" til at optage, hvordan en enkelt ladning bevæger sig igennem deres prøve, et specialdesignet molekyle, efter at det er blevet belyst af en laserpuls.

Hurtige optagelser

I det 700 meter lange japanske røntgenlaseranlæg accelereres elektroner op til næsten lysets hastighed for til sidst at afgive røntgenstråling. Røntgenstråler har samme bølgelængde som bindingerne mellem atomer i et molekyle, så de spredes fra molekylet på samme måde som synligt lys fra rillerne i en cd.

Ved at filme dette spredningssignal kan man følge med i, hvordan molekylernes struktur ændrer sig, efter de er blevet anslået af laserpulsens. Det går så vanvittig stærkt, at forskerne skal tage billeder på femtosekundtidsskalaen for at kunne fange atomernes bevægelse. Forholdet mellem et femtosekund og et sekund er som forholdet mellem et sekund og 32 millioner år.

Fremtiden ser lys ud

Der er ingen garanti for, at forskerne overhovedet får skabt deres egen molekylære film, og om de kan forstå, hvad den fortæller. Til gengæld er perspektiverne med de nye store røntgenanlæg

uandede. DTU Kemi og DTU Fysik er i disse år ved at opbygge en ekspertise i disse store højteknologiske røntgenanlæg.

"De ultrakorte røntgenpulse gør det muligt for os at se still-billeder af molekyler i bevægelse og dermed kaste lys på fundamentale processer inden for f.eks. kemi, biologi og teknologi," fortæller lektor Klaus B. Møller, der er vejleder på Asmus Ougaard Dohns ph.d.-projekt.

"Målet er at udvikle et oversættelsesapparat mellem de data, vi optager, og billeder med atomar opløsning i både tid og rum, der kan visualisere molekylers strukturelle dynamik under kemiske reaktioner i samme øjeblik, som de finder sted. Lykkes det, vil det give et hidtil uset indblik ind i kemiens verden, og resultaterne kan lede til helt nye metoder til at optimere kemiske reaktioners forløb," siger Klaus B. Møller.

Det kan ifølge Klaus B. Møller være med til at fremme den teknologiske udvikling af fotokatalysatorer, der i sidste ende kan omsætte solens lys til kemisk energi.

Udover Asmus Ougaard Dohn og Klaus B. Møller deltog ph.d.-studerende Kasper Skov Kjær, Tim Brandt Van Driel og Tobias Harlang, forskerne Kristoffer Haldrup og Morten Christensen og professor Martin Meedom Nielsen fra DTU Fysik. Også forskere fra Sverige og Ungarn deltog i eksperimentet.

Specialdesignet molekyle

Når eksperimenterne er gang i røret oppe i det japanske højland, suser kompakte bundter af elektroner, der udsender røntgenstråling, af sted med tæt ved lysets hastighed på vej mod det specialdesignede molekyle, som forskerne har medbragt.

Asmus Ougaard Dohn skal gerne have brugbare data med hjem til sit ph.d.-projekt om ultrahurtig molekylær dynamik.

Læs hans dagbog, og find ud af, om det lykkes at filme en kemisk reaktion live.

- CHARLOTTE MALASSÉ



1 TÅLMODIGHED ER EN DYD

Det optiske bord med hele forsøgsopstillingen bliver samlet uden for den såkaldte "hutch", som er det rum, hvor den skal stå under hele eksperimentet. Men forskerne må væbne sig med tålmodighed, for først skal det lokale "beamline-crew" justere en masse forskellige positioner i opstillingen. Der går mange timer med at få alt på plads, førend forskerne er klar til at filme - dvs. åbne for laseren, sætte den kemiske reaktion i gang og følge den.



3 PLASTICPOSE REDDER FORSØGET

Røntgenlaser-faciliteter repræsenterer noget af det ypperste, mennesket kan bygge. Men klargøringen af udstyret er altid en mærkværdig kombination af ultra-højteknologi og helt lavpraktiske løsninger. For at sikre at emissionen fra prøven når at blive opfanget af den rigtige detektor uden at blive absorberet på vejen, skal den atmosfæriske luft skiftes ud med helium. Det klares med en skraldepose sat fast med gaffatape mellem prøve og detektor.



Røntgenlaseranlægget SACLA 100 km uden for Osaka. Til venstre det 700 meter lange rør, hvor forsøget foregår.

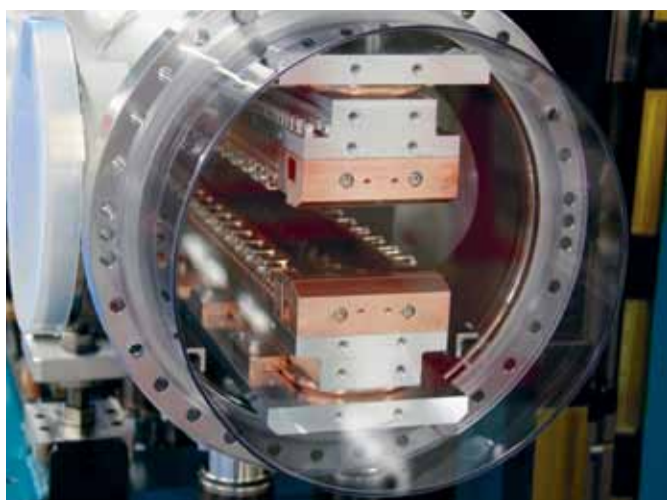
FA MERE AT VIDE

Klaus B. Møller
Lektor, DTU Kemi
klaus.moller@kemi.dtu.dk

Martin Meedom Nielsen
Professor, DTU Fysik
mmee@fysik.dtu.dk

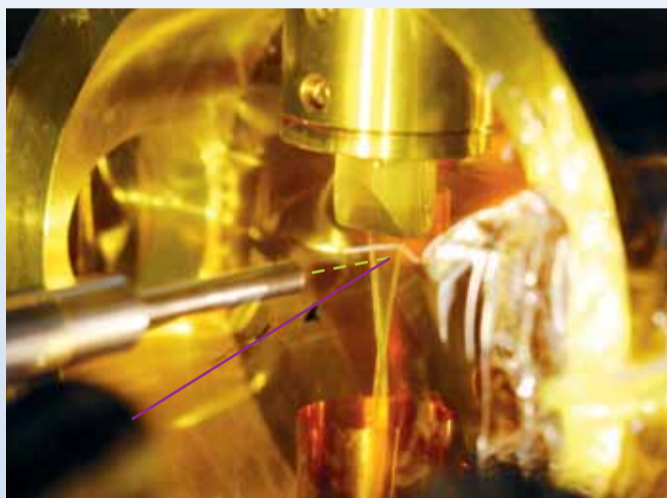
Asmus Ougaard Dohn
Ph.d.-studerende
asod@kemi.dtu.dk

Forskningsområdet Femto-kemi er vært for den stort anlagte konference "The 11th International Conference on Femtochemistry" på DTU i sommeren 2013, ledet af Asmus' medvejleder Niels Engholm Henriksen.



2 700 METER ULTRA-HØJTEKNOLOGI

Sådan ser røntgenlaseranlæggets 700 m lange rør ud indeni. Først accelereres bundter af elektroner op til næsten lysets hastighed i et elektrisk felt på 350 kV pr. cm. Herefter påvirkes elektronernes bane af kraftige magneter (vist i indsæt), hvorved de udsender ekstremt intense og kortvarige røntgenpulser, der til sidst adskilles fra elektronerne og sendes ind i den prøve, som forskerne har med hjemmefra.



4 HER RAMMER LASEREN MOLEKYLET

Prøven er et bi-metallisk kompleks (organisk molekyle) i væskeform, som aktiveres af en laser (det stiplede grønne lys) for at starte den kemiske reaktion. Den bliver så ramt af røntgenstråler (det violette lys), og det giver et spredningsmønster. En serie af spredningsmønstre kan kombineres til en slags film, der giver et billede af, hvordan molekylet opfører sig, når elektronen bevæger sig fra den ene ende af molekylet til den anden.

DAGBOG

Tre døgn i laserkanonen

Forskerholdets otte deltagere fra Danmark, Sverige og Ungarn havde "beamtid" på det japanske anlæg fra fredag kl. 10.00 til mandag kl. 10.00. Læs Asmus Ougaard Dohns beretning fra de tre nervepirrende døgn sammen med laserkanonen.

Dag 0 - Held og lykke

17:55 LOKAL TID, OSAKA, JAPAN Jeg er netop ankommet til røntgenanlægget SACLA sammen med min vejleder Klaus Braagaard Møller fra DTU Kemi. Vagten i porten har lige sagt „good luck with your investigation“. Vi håber, hans velsignelse vil bære frugt.

Der er 5 minutter til aftenmødet i det klinisk kolde konferencerum. Det ligger på etagen over 'The Experimental Hall', der bl.a. indeholder den 'hutch', hvor vi skal foretage vores eksperimenter. Hutch'en er endestationen for den 700 m lange rejse som bundter af elektroner foretager sig ca. 400.000 gange i sekundet for at aflevere næsten 10 milliarder røntgenfotoner ind igennem vores prøve. 10 milliarder fotoner pr. elektronbundt. Der er knald på.

20:00 Mødet er overstået, og mine medstuderende, som ankom for et par dage siden, har sat en rigtig lovende forsøgsopstilling op. Vi skal både måle røntgen-emissionen og -spredningen fra vores prøve og på den måde forhåbentlig følge, hvordan molekylernes struktur ændrer sig.

Dag 1 - Drillerier og klapsalver

23:00 Vi overtog hutch'en kl. 10.00, og hele dagen er gået med at gøre beam-linjen parat til forsøget: Både røntgen- og laserpulserne rammer nu dér, hvor vores prøve skal sidde. Men der er stadig en del tilpasninger.

Der er nok kokke til hands-on-arbejdet, så jeg prøver at få nogle kvantemekanik-beregninger af det molekyle, vi skal måle på, op at køre hjemme på DTU's computerpark. Vi skal have et fornuftigt udgangspunkt på, hvordan det ser ud, for at kunne forstå de billeder af spredt røntgenstråling fra prøven, der forhåbentlig popper op på skærmen med 25 MB i sekundet, når vi sætter reaktionen i gang.

Men skidtet driller. 40 computere jonglerer i takt med matricer på livet løs hjemme i Lyngby, men kommer stadig til kort over for kompleksiteten af vores molekyle. Molekyler, der er velegnede til vores eksperimenter, giver ofte store hovedpiner rent teoretisk. Men mon ikke vi finder ud af det alligevel?

02:15 Da en fluktuerende, gul og aflang plet dukker op på computerskærmen, bryder gruppen ud i spontane klapsalver og skulderklap. Vi har nu konfirmeret, at forsøgsopstillingen virker.

03:00 Jeg er ved at blive lidt træt. Vi arbejder på en slags interimistiske skiftehold, og jeg vil rigtig gerne være med til at tage de første rigtige målinger. Så jeg tilfører lidt umiddelbar energi med 15 minutters nostalgisk drum'n'bass-mix i mine hovedtelefoner, mens jeg skriver dette.

05:30 Nu er flow-systemet endelig monteret, så vores prøveopløsning kan cirkulere rundt i forsøgsopstillingen. Det tog en del lirke og kravlen rundt på det optiske bord, hvor vores opstilling står. Jeg kan ikke

lade være med at tænke på, at hvis man skubber til den forkerte dims, kan de sidste 5 timers justeringer gå tabt ...

Dag 2 - En hård kamp

22:00 Dag 2 er ved at være slut, og halvdelen af beam-tiden er gået. Vi har ikke fået brugbare data endnu.

Kl. 6 i morges var det svært at holde sig vågen, så jeg kastede håndklædet i ringen. Var tilbage igen kl. 13, og nu er det enormt svært at holde styr på alt det, der er sket i dag. Overordnet set har der hverken været altødelæggende katastrofer eller mirakuløse gennembrud. Det har snarere været 2 skridt frem og 1,9 skridt tilbage.

Dag 3 - Vi satsede ...

14:00 Er tilbage på beam-linjen efter at have fået et par timers søvn. På trods af ihærdig søgen er det endnu ikke lykkedes os at finde et signal, vi rigtig kan stole på.

Jeg læser lidt i logbogen, som vi altid laver som et Google-dokument. Så kan vores kollegaer derhjemme følge med i realtime, og alle kan tilgå dokumentet samtidig.

Pludselig fyldes side efter side med p'er. En kollega er faldet i søvn med hånden på tastaturet. Jeg går hen og vækker ham. Hvis dette var skønlitteratur, havde tasten været 'z'.

23:30 Jeg er p.t. et lavteknologisk data-pakæsel, der sørger for, at vi så hurtigt som muligt får overført data fra detektoren til vores computere i et format, vi kan bruge. Kasper sidder ved siden af mig og roder med den preliminære analyse.

Pludselig klapper han i hænderne og bryder ud i en slags sejrdsdans. På skærmen foran ham er en graf, der - godt gemt i støj og snask - har en umiskendelig betydning:

Vi har et tidsopløst sprednings-signal - vi kan lave vores film!

Der er nu evidens for, at vi har fanget „et eller andet, der bevæger sig i molekylet“, som vi kan arbejde videre med. Det ser ud, som om satsningen med at tage til anlægget i Japan har kunnet betale sig. Vi har endda otte timer tilbage af beam-tiden. På en XFEL er det meget tid til at samle data i.

Vi gjorde det sgu, og når vi kommer hjem, begynder arbejdet først rigtigt ...

Dag 4 - Klar til næste hold

Kl. 10.00 afleverer vi hutch'en til det næste hold. Det viser sig at være forskere fra det koreanske universitet KAIST, som min vejleder sjovt nok arbejder sammen med i anden sammenhæng.

Epilog

Efter hjemkomsten hygger jeg mig nu med mine beregninger og er i gang med at simulere det, vi har fået ud af vores eksperimenter i Japan. Hvis simuleringerne passer på de data, vi har med hjem fra Japan, er vi glade. Men det kommer til at tage tid.

Videnskab er ikke så dramatisk som på film, og jeg minder ofte mig selv om, at gennembrud kommer stille og roligt. Men grundforskning er så dybt fascinerende, fordi vi forsøger at finde ud af, hvordan naturen virker.



DR. DOHN OG DJ ODSAT

Asmus Ougaard Dohn er ph.d.-studerende på DTU Kemi i perioden 2011-2014. Han er 27 år og kandidat fra Nano-Science Center på KU. Når han ikke forsker, optræder han under navnet Asmus Odsat som en del af den nyere generation af Københavns DJ's udi elektronisk musik.

ladingen. Det tog en del lirke og kravlen rundt på det optiske bord, hvor vores opstilling står. Jeg kan ikke