ЕВРОПЕЙСКИЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ ЛАЗЕР НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ:
ФЕМТОСЕКУНДНОЕ ВРЕМЕННОЕ РАЗРЕШЕНИЕ И ДРУГИЕ УНИКАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

УДК 535-34
ВАК 02.00.02

Гудилин Д.Ю., к.т.н., ООО "ЛабПро Медиа"

В конце ноября 2019 года 10-летний юбилей отпраздновал European XFEL – международный проект по созданию лазера на свободных электронах, который реализуется в Германии силами 12 стран, включая Россию. Первая очередь уникального исследовательского комплекса была сдана в эксплуатацию 1 сентября 2017 года. С тех пор его возможности постепенно наращиваются: запускаются новые источники излучения, совершенствуются системы фокусировки и диагностики, устанавливаются новые аналитические приборы, детекторы и другое оборудование.

Принцип работы рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL – X-Ray free-electron laser) основан на прохождении разогнанного на линейной траектории до релятивистских скоростей пучка электронов через систему магнитов с чередующимися полярностями – ондулятор. Под действием магнитных полей электроны в ондуляторе совершают периодические синусоидальные колебания, в результате чего потерянная ими энергия преобразуется в поток фотонов. Путем подбора параметров системы – энергии электронного пучка, напряженности магнитного поля и геометрии расположения магнитов можно добиться генерации рентгеновского излучения с недостижимыми в традиционных синхротронных источниках уровнями когерентности и яркости.

В настоящее время, помимо European XFEL, в мире работают четыре лазерных комплекса на свободных электронах, способных генерировать жесткое рентгеновское излучение с длиной волны порядка или менее 0,1 нм, что необходимо для определения структурных свойств материалов с атомным разрешением:

- LCLS (Linac Coherent Light Source) в Стэнфорде (США), запущенный в 2009 году и генерирующий излучение с длиной волны 0,15 нм при частоте 120 имп./с;
- SACLA в Японии, запущенный в 2011 году и генерирующий излучение с длиной волны 0,06 нм при частоте 60 имп./с;
- SwissFEL в Швейцарии, запущенный в 2016 году и генерирующий излучение с длиной волны 0,1 нм при частоте 100 имп./с;
- PAL (Pohang Accelerator Laboratory) в Южной Корее, запущенный в 2016 году и генерирующий излучение с длиной волны 0,06 нм при частоте 60 имп./с.

Принципы работы European XFEL и перечисленных установок очень похожи за одним исключением: в европейском проекте в ускорителе электронов впервые использовано явление сверхпроводимости.

Лазерная установка European XFEL расположена на глубине от 6 до 38 м под землей и протянулась на 3,4 км от исследовательского центра DESY (Deutsches Elektronen-Synchrotron – Немецкий электронный синхротрон) в Гамбурге до окраины города Шенефельда. Общая площадь территории центра – около 18,5 га. Линейный ускоритель длиной 1,7 км разгоняет электроны при температуре –271 °С до энергии от 10 до 17,5 ГэВ, причем в дальнейшем это значение может быть увеличено.

Сверхпроводимость позволяет создавать электронный пучок особенно высокого качества и генерировать ультракороткие вспышки с частотой 27 тыс. имп./с (рис.1), яркость которых в миллиард раз выше, чем у самых мощных тради-

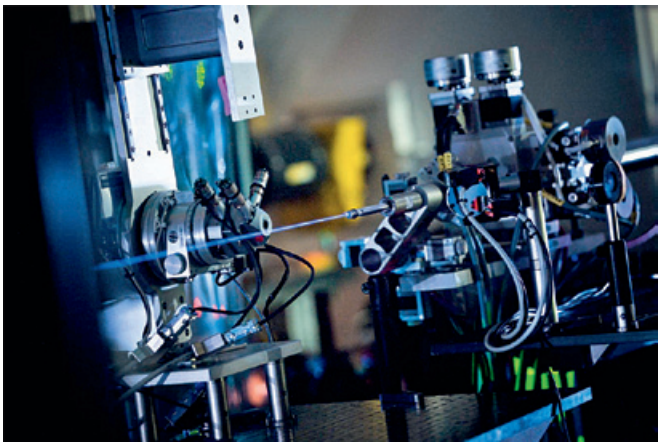


Рис.1. *Луч рентгеновского излучения, получаемого в European XFEL*

DOI: 10.32757/2619-0923.2020.1.11.58.68

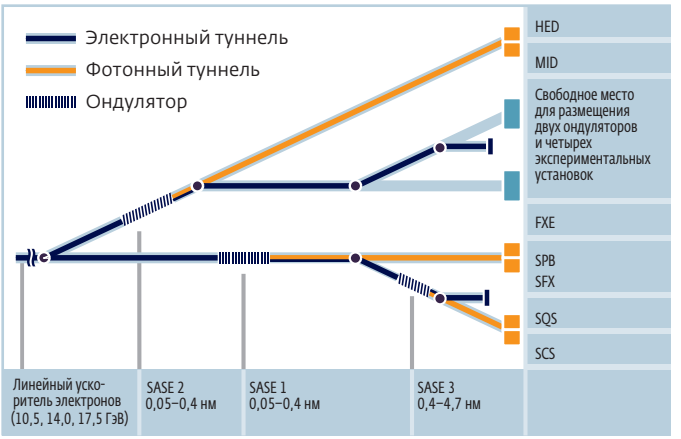


Рис.2. *Лазерная установка European XFEL протянулась под землей на 3,4 км от Гамбурга до Шенефельда*

ционных синхротронных источников. Длина волны излучения составляет от 0,05 до 4,7 нм, позволяя наблюдать процессы на атомарном уровне. Благодаря малой длительности импульса можно осуществлять съемки сверхбыстрых процессов, происходящих в материалах разной природы.

Комплекс включает систему туннелей с двумя основными линиями (рис.2). В нижней линии установлен ондулятор SASE1, генерирующий жесткое рентгеновское излучение с энергией фотонов от 3 до 25 кэВ, а в ее боковом ответвлении – ондулятор SASE3, генерирующий мягкое рентгеновское излучение с энергией фотонов от 0,26 до 3 кэВ. В верхней линии ондулятор SASE2, идентичный первому ондулятору, генерирует жесткое рентгеновское излучение, а боковое ответвление пока свободно и будет использоваться для дальнейшего развития комплекса. Ондуляторы SASE1 и SASE2 состоят из 35 магнитных сегментов, каждый длиной 5 м, установленных с периодом 40 мм. Ондулятор SASE3 состоит из 21 такого сегмента, установленных с периодом 68 мм. Каждый ондулятор снабжает излучением по две экспериментальных установки, причем в будущем их число может быть увеличено до трех установок на один ондулятор.

В настоящее время используются шесть экспериментальных установок:

- фемтосекундных рентгеновских экспериментов (FXE – femtosecond X-ray experiments);
- физики высоких плотностей энергии (HED – high energy density);
- визуализации структуры и изучения динамики материалов (MID – materials imaging and dynamics);
- спектроскопии и когерентного рассеяния (SCS – spectroscopy and coherent scattering);
- исследования частиц, кластеров и биомолекул, а также фемтосекундной кристаллографии (SPB/SFX – single particles, clusters, and biomolecules & serial femtosecond crystallography);
- малых квантовых систем (SQS – small quantum systems).

Краткая информация об установках представлена в табл.1. Ниже рассмотрим их конструкцию и возможности более подробно.

FXE

Установка FXE (рис.3) предназначена для исследования динамики электронных и ядерных процессов в сложных химических системах в фемтосекундном масштабе времени. В частности, на установке проводятся эксперименты в области химической динамики, фотоэлектрических преобразований, фотосинтеза, каталитических процессов, физики материалов. С целью изучения механизмов химических и биохимических реакций в жидких и твердых веществах применяются абсорбционная и эмиссионная спектроскопия, а также дифракционные методы:

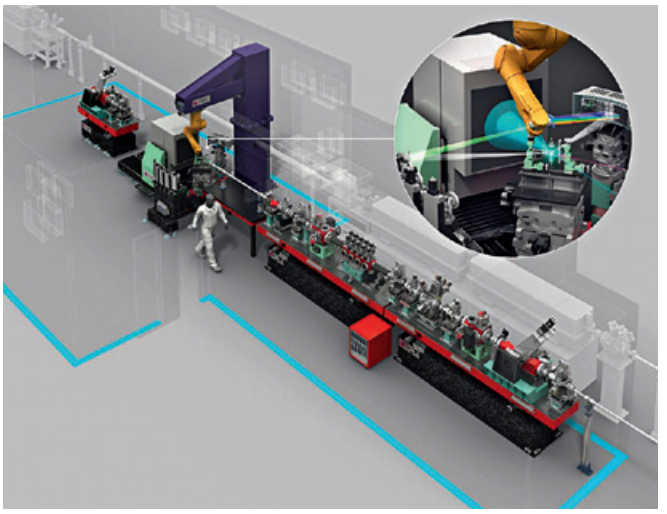
- исследование ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения (XANES – X-ray absorption near edge structure), которое позволяет отслеживать изменение окисления, молекулярные симметрии реагирующих частиц, а также состояние низких незанятых молекулярных орбиталей;
- анализ протяженной тонкой структуры рентгеновского поглощения (EXAFS – extended X-ray absorption fine structure) для определения геометрии молекулярной структуры вблизи исследуемого атома;
- нерезонансная рентгеновская эмиссионная спектроскопия (NXES – non-resonant X-ray emission) для определения спинового состояния частиц по спектрам K_α и K_β, а также получения информации о химическом составе на основе спектров переходов электронов из валентной зоны на уровень ядра (valence-to-core).

Табл.1. *Экспериментальные установки комплекса European XFEL*

Обозначение	Краткое описание	Решаемые задачи			Источник излучения	Начало эксплуатации
		Исследования сверхмалых частиц	Исследования сверхбыстрых процессов	Исследования в экстремальных условиях		
FXE	Исследование динамики твердых тел, жидкостей, газов с фемтосекундным временным разрешением	–	+	–	SASE1	Сентябрь 2017 года
HED	Исследование вещества в экстремальных условиях	–	+	+	SASE2	Май 2019 года
MID	Исследование структуры и динамики ее изменения на наноуровне	+	+	–	SASE2	Март 2019 года
SCS	Исследование электронной и атомной структуры и динамики наносистем, а также биологических объектов	+	+	–	SASE3	Декабрь 2018 года
SPB/SFX	Сверхбыстрая когерентная дифракционная визуализация отдельных частиц, кластеров и биомолекул. Последовательная фемтосекундная кристаллография	+	+	–	SASE1	Сентябрь 2017 года
SQS	Исследование атомов, ионов, молекул и кластеров в интенсивных полях и при нелинейных явлениях	–	+	+	SASE3	Ноябрь 2018 года

Для этого установка укомплектована дисперсионным спектрометром, построенным по схеме Гамоша, и сферическим спектрометром Иоганна;

- резонансная рентгеновская эмиссионная спектроскопия (RXES – resonant X-ray emission spectroscopy);
- рентгеновская рамановская спектроскопия (XRS – X-ray Raman spectroscopy);
- спектроскопия диффузного рассеяния рентгеновского излучения (XDS – X-ray diffuse scattering), включая широкоугловое (WAXS – wide-angle X-ray scattering) и малоугловое (SAXS – small angle X-ray scattering) рентгеновское рассеяние для изучения структурных изменений в сольватированных комплексах, в том числе сольватной оболочки вокруг реагирующей молекулы;
- рентгеноструктурный анализ (XRD – X-ray diffraction), позволяющий регистрировать в материалах структурные изменения, связанные с переходными про-



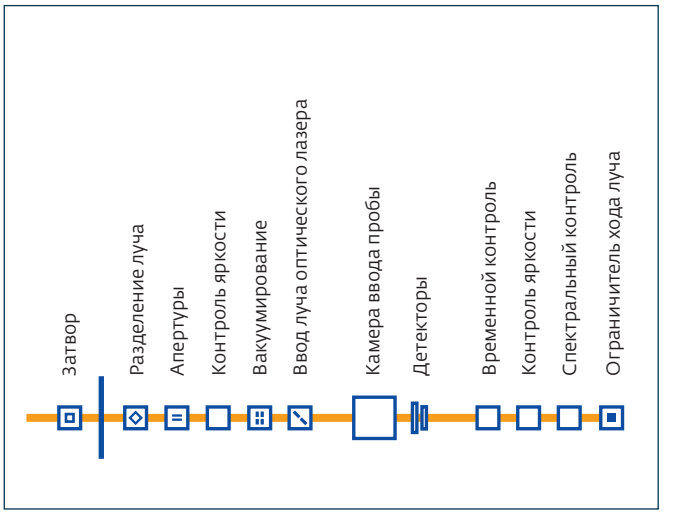


Рис.3. *Вид и схема установки фемтосекундных рентгеновских экспериментов FXE*

цессами, такими как фазовые переходы, перенос заряда и т. д.

Энергия рентгеновского пучка в установке настраивается в диапазоне 5–20 кэВ. Каждый импульс содержит до 10^{12} фотонов. Таким образом, поскольку каждая последовательность включает около 1000 импульсов, то при частоте 10 последовательностей/с первичный пучок содержит до 10^{16} фотонов.

У выхода из туннеля расположен 4-кратный монохроматор на кристалле Si (111). Для фокусировки излучения служат две системы бериллиевых составных преломляющих линз, одна из которых установлена в туннеле, вторая – в блоке FXE. Применение различных комбинаций линз позволяет настраивать величину диаметра луча, а водяное охлаждение обеспечивает стабильность фокусировки. Алмазная дифракционная решетка разделяет излучение на три части: основной луч для проведения анализа и два опорных луча, использующихся в дисперсионном анализаторе спектра и для синхронизации фемтосекундных измерений.

Дисперсионный спектрометр определяет спектральную интенсивность входящего в установку излучения по величине дифракции, когда пучок проходит через тонкий монокристалл алмаза, полученный методом CVD. Монокристалл охлаждается водой для предотвращения теплового дрейфа спектральных характеристик. В случае анализа тонких пленок и других высокочувствительных образцов интенсивность излучения понижается аттенюатором.

Анализ пробы выполняется в воздушной среде или в атмосфере гелия. Жидкие пробы вводятся инжекторами с сапфировыми насадками различного диаметра. Скорость раствора – до 5 м/с. Пробы на водной основе могут вводиться при комнатной температуре специальным инжектором, обеспечивающим плоскую форму струи толщиной 1–100 мкм. Твердые образцы размещаются на столике с возможностью регулировки положения и угла поворота во всех трех плоскостях. Для оптической накачки пробы служат фемтосекундные лазеры с длинами волн 800 и 1030 нм, а также терагерцовый с длиной волны 1 мм.

Спектрометр Гамоша включает 16 дисперсионных элементов. Применение сменных кристаллов позволяет регистрировать все спектральные линии K_α и K_β любого элемента в диапазоне энергий излучения 5–12 кэВ. При этом возможно получение эмиссионных спектров одновременно большего числа элементов. В спектрометре, построенном по сферической схеме Иоганна, устанавливаются до пяти кристаллов с кривизной 1, 2 или 3 м.

В установке используется детектор LPD (Large Pixel Detector), специально разработанный лабораторией Резерфорда–Эплтона в Великобритании. Чувствительная область детектора образуется матрицей 1024 × 1024 пикселей размером по 500 мкм, состоящей из 256 сменных прямоугольных модулей по 128 × 32 пикселей каждый. Матрица разделена на четыре квадратные части, которые перемещаются независимо друг от друга при настройке размера центрального отверстия для пропускания прямого луча. Кремниевые элементы имеют квантовую эффективность более 80% в диапазоне энергий фотонов 1–13 кэВ и около 40% при 20 кэВ. Динамический диапазон LPD достигает 105 фотонов при энергии 12 кэВ. Электроника детектора поддерживает три ступени усиления – 1x, 10x, 100x.

Рабочая частота составляет до 4,5 МГц, при этом до 512 полных кадров могут быть сохранены в памяти детектора. Предусмотрена функция отбраковки низкокачественных изображений в режиме реального времени.

Для позиционирования и перемещения образцов, детекторов и сменных кристаллов спектрометров в установке предусмотрен робот-манипулятор с шестью степенями свободы, пригодный для объектов массой до 15 кг. Точность позиционирования – 35 мкм.

HED

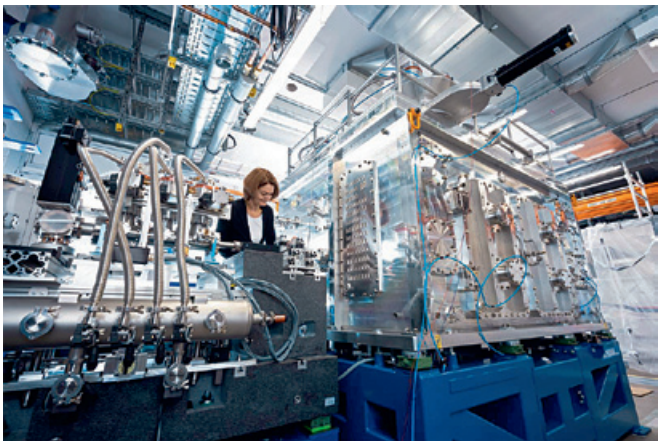
Установка HED (рис.4) – уникальная платформа для экспериментов с сочетанием воздействия жестким рентгеновским излучением, экстремальными давлениями и температурами, а также электрическими и магнитными полями с использованием высокоэнергетических оптических лазеров, ячеек с алмазными наковальнями и импульсных магнитов. При этом могут использоваться методы рентгеноструктурного анализа, малоуглового рентгеновского рассеяния, рентгеновской абсорбционной спектроскопии (XAS – X-ray absorption spectroscopy), рентгеновского неупругого рассеяния (IXS – inelastic X-ray scattering) и рентгеновской эмиссионной спектроскопии. Круг решаемых задач включает исследование свойств твердого вещества после экстремального возбуждения, в состояниях экстремального давления или в очень сильных импульсных магнитных полях, а также эксперименты в области физики плазмы и квантовых состояний, получаемых под воздействием сверхмощных лазерных импульсов.

В установку подается излучение с энергией 5–25 кэВ с номинальной шириной полосы $\Delta E/E$ около 10^{-3}. 4-кратный монохроматор на кристалле Si (111) позволяет уменьшить ширину полосы до 10^{-4}, а с помощью монохроматора на кристалле Si (533) полоса пропускания может быть сужена до $\approx 5 \cdot 10^{-6}$ при энергии фотонов 7,5 кэВ.

Система бериллиевых параболических составных преломляющих линз фокусирует рентгеновский луч в пятно размером 1–200 мкм. Используются четыре группы линз: первые две расположены в рентгеновском туннеле, третья – в оптическом блоке, четвертая – рядом с областью ввода пробы. Рентгеновский луч может быть разделен на две части с разными, независимо настраиваемыми интенсивностями. Максимальное время задержки при энергии 20 кэВ составляет 2 пс, при 5 кэВ – 23 пс.

В экспериментальном блоке предусмотрено две области измерения. В первой поддерживается вакуум на уровне 10^{-4} мбар, и от блока рентгеновской оптики она отделена промежуточной камерой с дифференциальной откачкой или алмазным окном. Если в первой измерительной области реализуются дифракционные методы, рентгеновское неупругое рассеяние, а также другие разновидности спектрометрии, то во второй – эксперименты с алмазными наковальнями, воздействием магнитных полей и при экстремальных температурах.

Установка оснащена двумя детекторными модулями EIPX100 на базе чипа размером 35×38 мм с шагом пикселя 50 мкм и динамическим диапазоном 10^2 при энергии 8 кэВ, подключенными к спектрометрам Брэгга. Три модуля EPIX10k с такими же размерами чипа, но шагом пикселей 100 мкм обеспечивают улучшение динамического диапазона до 10^4 при переключении усиления. Также используются четыре детектора JUNGFRAU с размером чипа 40×80 мм, шагом пикселя 75 мкм и динамическим диапазоном



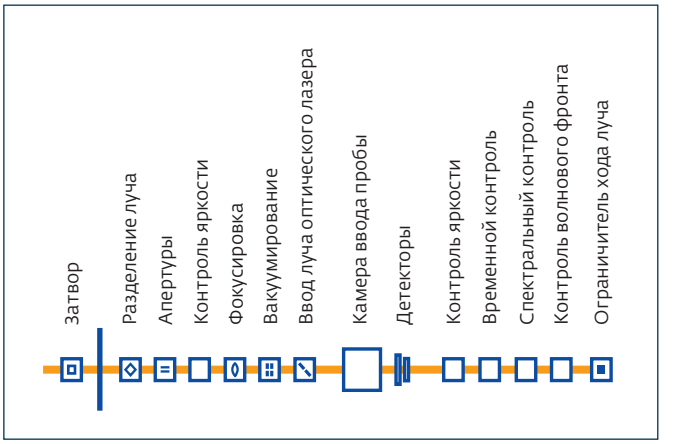


Рис.4. *Вид и схема установки физики высоких плотностей энергии HED*

10^4 при 12 кэВ. Последние два набора детекторов оптимальны для регистрации дифракции рентгеновских лучей.

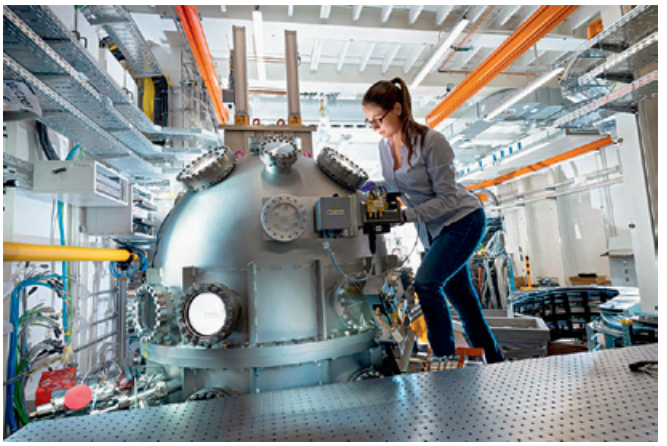
Планируется дополнительно укомплектовать установку детекторами с большей рабочей площадью для экспериментов по рентгеновской визуализации и малоугловому рентгеновскому рассеянию с возможностью изменения расстояния от области ввода пробы до детектора. Кроме того, консорциум HIBEF намеревается интегрировать в HED детектор с адаптивным усилением AGIPD (Adaptive Gain Integrating Pixel Detector).

Для экспериментов по изоэнтропийному линейному сжатию материала предназначен лазер DiPOLE-100X с диодной накачкой, обеспечивающий энергию до 80 Дж при длине волны 515 нм и длительности импульса 2–15 нс. Также планируется укомплектовать установку еще одним наносекундным лазером и 800 нм титан-сапфировым лазером мощностью 100 МВт, генерирующим импульсы менее 25 фс. Последний будет использоваться в основном для экспериментов по релятивистскому взаимодействию лазерного излучения с веществом.

MID

Установка MID (рис.5) предназначена для материаловедческих исследований с использованием уникально высоких когерентных свойств рентгеновского излучения XFEL. Благодаря высокой энергии излучения и применению сверхкоротких импульсов можно изучать материалы на новом уровне пространственного и временного разрешения. Среди решаемых задач – трехмерная визуализация структур и исследование динамики процессов от вязкоупругого течения или рассеяния в жидкостях до полимеризации, сворачивания белков, фазовых переходов в кристаллах, сверхбыстрых спиновых переходов и переключений магнитных доменов. Установка позволяет реализовывать следующие экспериментальные методики:

- когерентная дифракционная томография (CDI – coherent diffraction imaging) для исследований в обширной области от физики конденсированных сред до изучения биологических объектов, таких как клетки и вирусы;
- рентгеновская фотонная корреляционная спектроскопия (XPCS, X-ray photon correlation spectroscopy) для исследования динамики структурных изменений при изучении равновесных и неравновесных процессов в материалах. Высококогерентный поток XFEL позволяет анализировать временную автокорреляционную функцию интенсивности рассеянного излучения с большей точностью, чем это было возможно ранее. Например, появилась возможность изучения динамики свойств поверхности и границы раздела в атомном и молекулярном масштабе. Кроме того, анализ при энергиях фотонов до 25 кэВ позволяет исследовать динамику границ раздела "жидкость-жидкость" и "жидкость-твердое вещество";
- рентгеновский кросс-корреляционный анализ (XCCA – X-ray cross correlation analysis), позволяющий выполнять пространственную реконструкцию нанообъектов в случае, если в пробе присутствуют несколько идентичных объектов. Этот метод может применяться для увеличения отношения сигнал/шум при трехмерной реконструкции и визуализации;
- рентгеновская спекл-спектроскопия (XSVS – X-ray speckle visibility spectroscopy) для анализа динамики изменения исследуемой системы;



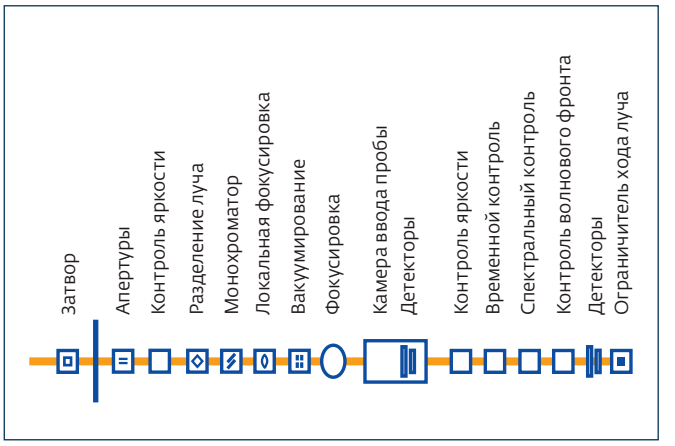


Рис.5. *Вид и схема установки визуализации структуры и изучения динамики материалов MID*

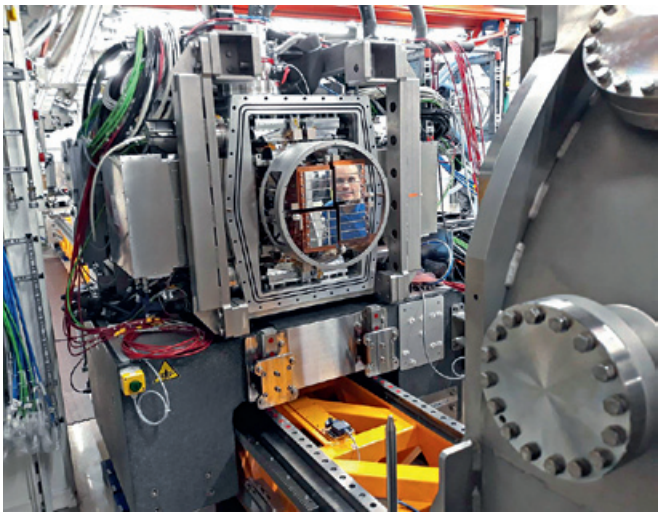


Рис.6. *Детектор с адаптивным усилением AGIPD*

- спектроскопия рассеяния рентгеновского излучения с разрешением во времени (time-resolved X-ray scattering) с заметно большими возможностями, чем даже на источниках синхротронного излучения третьего поколения.

Энергия рентгеновского излучения в MID настраивается в диапазоне от 5 до 25 кэВ. При 10 кэВ энергия импульса, содержащего $3 \cdot 10^{11}$ фотонов, составляет около 0,5 мДж. Два монохроматора на базе кристаллов Si (111) и Si (220) обеспечивают энергетическое разрешение $1{,}4 \cdot 10^{-4}$ и $5{,}9 \cdot 10^{-5}$ соответственно.

Для фокусировки служат две системы составных преломляющих линз. Дополнительно внутри экспериментальной камеры может устанавливаться нанофокусирующая линза, благодаря которой при энергии излучения 25 кэВ размер пятна может быть уменьшен до 37 нм.

Вместе с рентгеновским излучением в экспериментальную камеру может быть направлен согласованный с ним оптический лазерный луч с длительностью импульса от 100 до 15 фс, длиной волны 800 нм и мощностью до 3 мДж на импульс. Интенсивность, энергия, размер пятна и длительность импульса лазерного луча настраиваются в зависимости от требований проводимого эксперимента. Лазерный блок расположен рядом с установкой MID, что обеспечивает высокую стабильность параметров излучения и минимальные потери.

В экспериментальной камере создается вакуум 10^{-5}–10^{-1} мбар. Поскольку от источника фотонов луч проводится в сверхвысоком вакууме на уровне 10^{-9} мбар, перед камерой с образцом предусмотрена переходная секция, в которой давление будет плавно повышаться. Если же образец разрушается в вакууме, то камера изолируется, а излучение проводится через прозрачное алмазное окно. Жидкие образцы вводятся в камеру инжекторами, твердые – с помощью автоматического податчика. Образцы могут нагреваться, охлаждаться и помещаться в магнитное поле.

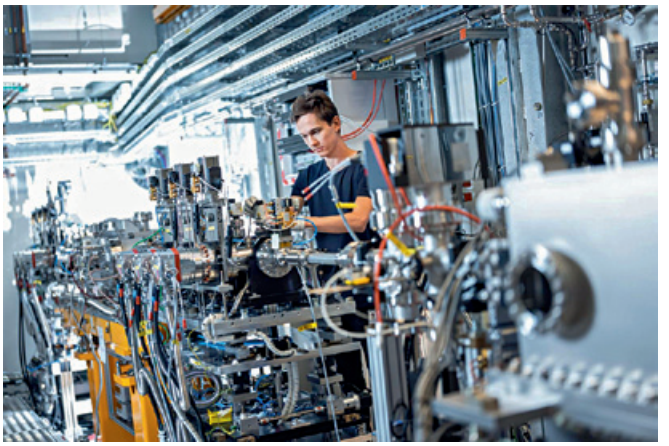
Основное решение для регистрации излучения – детектор с адаптивным усилением AGIPD (рис.6), который содержит 1024 × 1024 пикселей. Размер одного пикселя – 200 × 200 мкм. Максимальная частота регистрации импульсов – 4,5 МГц. Расстояние от образца до детектора может составлять до 8 м. Опционально детектор может быть установлен на восьмиметровом рычаге, благодаря которому может регистрировать рассеянное излучение в диапазоне углов от 0 до 50°. Также могут применяться другие детекторы, например одномегапиксельный JUNGFRAU, разработанный в швейцарском Институте Пауля Шеррера.

SCS

Установка SCS (рис.7) предназначена для исследования электронных свойств и структуры сложных материалов и наноструктур с высоким временным разрешением. В частности, в число решаемых задач входят изучение сверхбыстрых процессов намагничивания на наноуровне, наблюдение за химическими реакциями в жидкостях в реальном времени, а также развитие методов нелинейной рентгеновской спектроскопии.

Наряду с двумя основными экспериментальными станциями в установку входят химическая станция и спектрометр высокого разрешения RIXS (resonant inelastic X-ray scattering – рентгеновское резонансное неупругое рассеяние) от консорциума Heisenberg. Комбинация когерентного рентгеновского рассеяния с методами спектроскопии позволяет исследовать динамику процессов в фемтосекундных временных масштабах с пространственным разрешением до нескольких нанометров.

SCS использует поток излучения от ондулятора SASE3, который генерирует рентгеновские импульсы мощностью до 10 мДж и длительностью 1–100 фс при энергиях излучения 250–3000 эВ. В экспериментах может использоваться розовое или монохроматическое излучение. Системы зеркал Киркпатрика–Баеза фокусируют луч в двух станциях в пятно размером от 500 до 1–2 мкм. Больший диаметр пучка предпочтителен для спектроскопических исследований с высоким временным разрешением, так как в этом случае минимизируется риск повреждения образца без необходимости снижения энергии пучка.



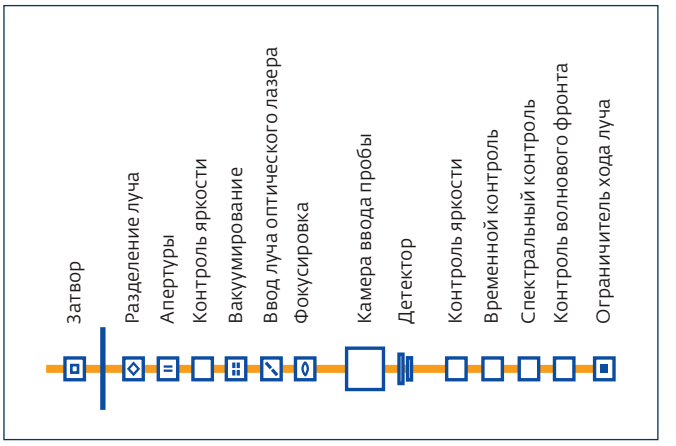


Рис.7. *Вид и схема установки спектроскопии и когерентного рассеяния SCS*

В одной из экспериментальных станций регистрируются прямое рассеяние и пропускание излучения с последующей обработкой методом быстрого преобразования Фурье, в другой станции – обратное рассеяние и отражение и применяется метод дифракции рентгеновских лучей. Одномегапиксельный детектор DSSC (DePFET sensor with signal compression – детектор на базе полевого транзистора с полностью обедненной подложкой со сжатием сигнала) (рис.8) работает с частотой 4,5 МГц и позволяет регистрировать до 800 кадров за одну последовательность импульсов. Двухмегапиксельный детектор на основе матрицы быстрых ПЗС работает с частотой 1 Гц и регистрирует 1 кадр за каждую последовательность импульсов.

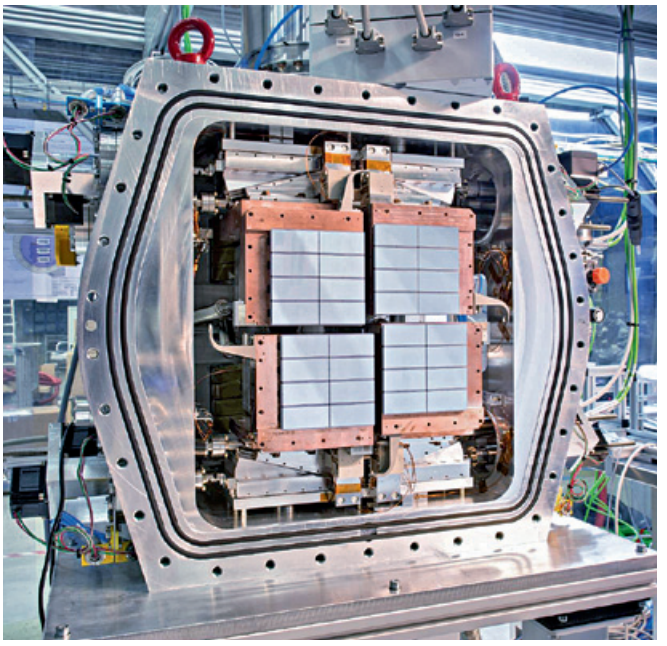


Рис.8. *Детектор DSSC*

SPB/SFX

Установка SPB/SFX (рис.9) предназначена для когерентной дифракционной визуализации отдельных частиц, кластеров, молекул и молекулярных систем, в том числе для определения структуры белков методом последовательной фемтосекундной кристаллографии. В частности, установка позволяет реализовывать метод трехмерной визуализации отдельных частиц (SPI – single particle imaging) путем последовательного экспонирования по-разному ориентированных в пространстве образцов с одинаковой структурой. Преимущество SPB/SFX состоит в повышении до 30 раз скорости сбора данных для трехмерной визуализации. Благодаря возможности изучения динамики химических реакций с фемтосекундным временным разрешением, на установке можно исследовать, например, процессы смешивания и реакции, инициируемые импульсом оптического излучения. Методом последовательной фемтосекундной кристаллографии в Европейском XFEL целесообразно изучать три класса образцов: кристаллы, размеры которых слишком малы, чтобы обеспечить достаточно высокое отношение сигнал/шум при дифракционном анализе на источниках синхротронного излучения; вещества, содержащие атомы металлов, претерпевающие химическое изменение под действием синхротронного излучения; системы, которые необходимо анализировать с фемтосекундным временным разрешением, а также при исследовании необратимых процессов типа перемешивания, когда необходимо точно определить момент начала реакции.

Пространственное разрешение системы позволяет визуализировать трехмерную структуру на уровне атомов. При этом возможно изучение динамики структурных трансформаций на временных интервалах от миллисекунды до фемтосекунды. Установка используется

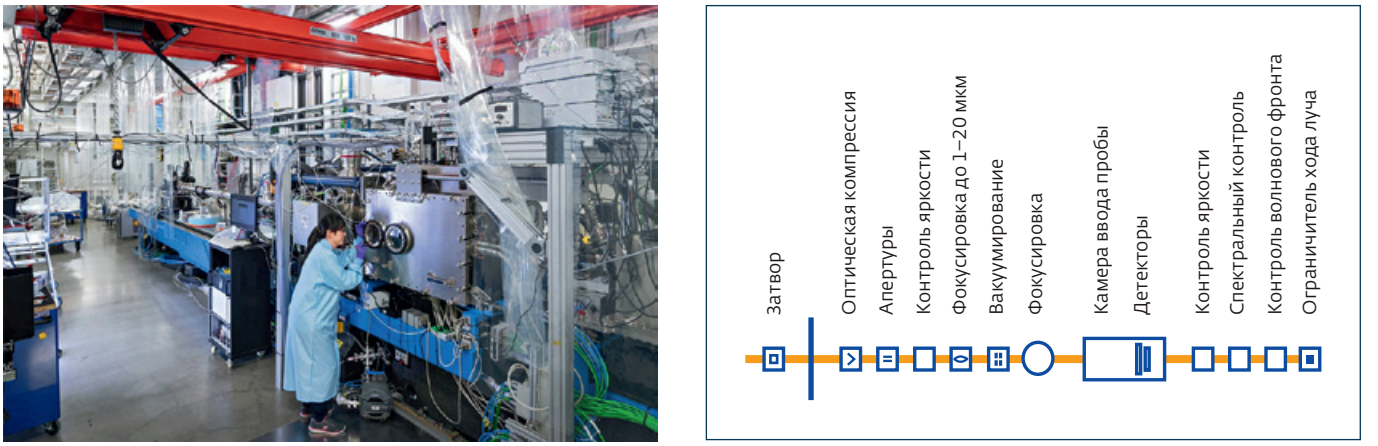


Рис.9. *Вид и схема установки исследования частиц, кластеров, биомолекул и фемтосекундной кристаллографии SPB/SFX*

в первую очередь для исследования биологических объектов – макромолекул, молекулярных комплексов, вирусов, органелл, клеток, хотя возможен также и анализ небиологических образцов.

SPB/SFX расположен на расстоянии около 900 м от ондулятора SASE1 и состоит из двух станций. Установка имеет несколько оптических систем для фокусировки рентгеновского пучка, встроенную лазерную систему для оптической накачки образца, рентгеновский детектор, который регистрирует рассеянное излучение, а также ряд дополнительных систем для управления и контроля параметров рентгеновских лучей.

Первая станция может использовать полный поток излучения от ондулятора SASE1. Последовательности импульсов повторяются с частотой 10 Гц. Каждая такая последовательность включает до 2700 импульсов с энергией 3–16 кэВ и длиной волны 4–0,8 Å. Энергия импульса длительностью 25 фс составляет не менее 1 мДж. Одна из двух зеркальных систем Киркпатрика–Баеза фокусирует луч в точку диаметром до 1 мкм или 100 нм соответственно, причем чем выше энергия пучка, тем меньше может быть размер точки. Первая система Киркпатрика–Баеза состоит из двух фокусирующих и двух плоских зеркал, вторая – только из двух фокусирующих зеркал. Поскольку вторая группа фокусирующих зеркал расположена достаточно близко к участку ввода проб первой экспериментальной станции, предусмотрена специальная система, поддерживающая сверхвысокий вакуум в зоне фокусировки. После первой станции луч направляется во вторую экспериментальную станцию, где фокусируется системой бериллиевых параболических составных преломляющих линз. Эксперименты могут проводиться одновременно в обеих станциях с одинаковыми параметрами фотонного пучка.

Так как на SPB/SFX исследуются пробы, обладающие большим разнообразием характеристик поглощения и отражения, для их оптической накачки предусмотрены три лазера:

- фемтосекундный с длиной волны 740–840 нм, генерирующий импульсы длиной 15–300 фс мощностью 50 мкДж;
- пикосекундный с длиной волны 1030 нм, генерирующий импульсы длиной 1–400 пс мощностью 1 мДж;
- наносекундная система с длиной волны 210–2400 нм, генерирующая импульсы длиной 3–7 нс мощностью 0,5–9 мДж.

В первых двух лазерах возможно использование генерации второй и третьей оптических гармоник для получения излучения меньших длин волн, обладающего при этом большей плотностью энергии по сравнению с излучением наносекундного лазера.

Камера ввода пробы имеет несколько портов для инжекторов различных типов. В частности, могут применяться инжекторы для впрыска жидкостей разной вязкости и аэрозолей, а также держатель мишеней для особо ценных образцов, имеющихся в малых количествах. В последнем случае энергию излучения целесообразно понижать, чтобы получать несколько снимков до разрушения пробы. При циклическом впрыскивании проб, как правило, используются сверхкороткие мощные импульсы.

Первая экспериментальная станция установки оснащена одномегапиксельным AGIPD-детектором, который составлен из 16 линеек чипов по 512 × 128 пикселей каждая. Размер одного пикселя – 200 × 200 мкм. При энергии фотонов 12 кэВ обеспечивается динамический диапазон 10^4 фотонов/пиксель. AGIPD позволяет регистрировать до 352 кадров за одну последовательность импульсов. Расстояние от зоны ввода образца

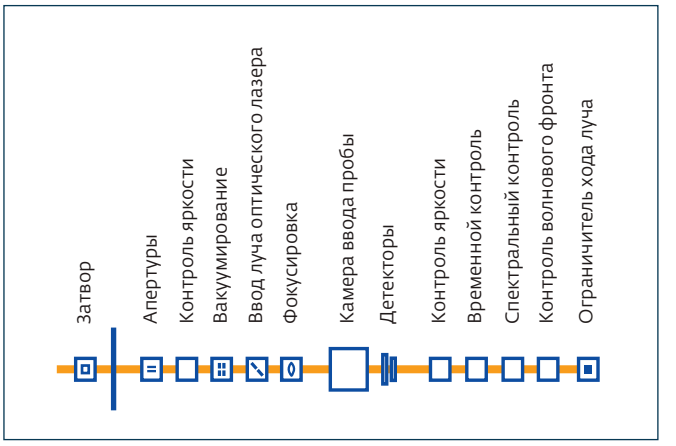


Рис.10. *Вид и схема установки исследования малых квантовых систем SQS*

до детектора может составлять от 129 мм до 5,5 м. Во второй экспериментальной станции планируется установить AGIPD-детектор размером 4 мегапикселя.

SQS

Установка SQS (рис.10) предназначена для исследования взаимодействия света с веществом, в частности, процессов, происходящих под воздействием ультракоротких высокоинтенсивных рентгеновских импульсов, с использованием различных методов спектроскопии. Типичными изучаемыми объектами являются отдельные частицы в газовой фазе, в том числе, атомы, молекулы, ионы, наночастицы, большие биомолекулы, кластеры частиц. На SQS исследуются нелинейные явления, обусловленные взаимодействием фотонов с веществом, такие как фотоионизационные и многофотонные процессы, проводятся эксперименты с высоким временным разрешением в области фотоионизации в интенсивных внешних полях и газофазной фотохимии, а также с применением дифракционной визуализации. Использование мягких рентгеновских фотонов обеспечивает контролируемое возбуждение определенных электронных оболочек атомов.

Установка имеет три экспериментальные станции:

- атомно-подобных квантовых систем (AQS – atomic-like quantum systems) для экспериментов на атомах и малых молекулах;
- наноразмерных квантовых систем (NQS – nano-size quantum systems) для исследования более крупных объектов, таких как кластеры частиц и наночастицы;
- исследования реакций (REMI – reaction microscope), позволяющая детально изучать процессы ионизации и фрагментации в небольших системах частиц.

От ондулятора SASE3 поступает поток мягкого рентгеновского излучения с энергией от 0,27 до 3 кэВ и плотностью мощности до 10^{15} Вт/см^2. Генерируются импульсы длительностью 2–100 фс, в каждом из которых содержится более 10^{12} фотонов. Две группы эллиптических зеркал Киркпатрика–Баеза фокусируют луч в точку диаметром менее 1 мкм, повышая плотность мощности до 10^{18} Вт/см^2.

В камере станции AQS поддерживается вакуум на уровне 10^{-10} мбар. Конструкция с двумя областями измерения, расположенными на расстоянии 35 см друг от друга, позволяет одновременно устанавливать несколько разных спектрометров с возможностью быстрого переключения без необходимости продувки камеры.

Для измерений применяются электронные времяпролетные спектрометры (eTOF), спектрометр построения карт скоростей (VMI – velocity map imaging) и электронный спектрометр с магнитной ловушкой (MBES – magnetic bottle electron spectrometer).

Три одинаковых электронных времяпролетных спектрометра расположены в плоскости, перпендикулярной направлению распространения луча, и еще столько же – в задней полусфере. В сочетании с быстрым цифровым преобразователем они могут регистрировать электронные спектры высокого разрешения с частотой 4,5 МГц. Нижний eTOF первой группы позволяет обнаруживать ионы при переключении полярности приложенного напряжения.

Спектрометр VMI устанавливается сверху в перпендикулярной лучу плоскости и записывает спектры кинетической энергии ионов или электронов, в зависимости от полярности приложенного напряжения. При импульсном переключении напряжений возможно одновременное использование VMI для

обнаружения ионов и eTOF для регистрации электронов.

Электронный спектрометр с магнитной ловушкой может быть установлен в нижней части камеры. Магнитная ловушка обеспечивает времяпролетную спектроскопию до 100% электронов. Комбинация с ионным времяпролетным масс-анализатором Вили и Макларена (iTOF) позволяет проводить измерения электронов и ионов во всем диапазоне энергий.

В спектрометрах всех трех типов используются детекторы на основе микроканальной пластины, а в VMI и MBES к тому же еще и люминесцентный экран.

Станция NQS оснащена вакуумной системой с дифференциальной откачкой и позволяет одновременно использовать несколько типов детекторов фотонов и спектрометров.

Одномегапиксельный детектор DSSC с размером чувствительной зоны 210 × 210 мм способен регистрировать фотоны с энергией 0,5–6 кэВ. Рентгеновские изображения записываются с максимальной частотой 4,5 МГц. Четыре подвижных квадратных модуля, состоящих из кремниевых дрейфовых элементов шестиугольной формы, позволяют изменять размер центрального окна.

Еще один одномегапиксельный детектор фотонов основан на ПЗС с p-n-переходом. Он обладает эффективностью более 80% в диапазоне энергий 0,7–12 кэВ при очень низком уровне шумов. Два подвижных модуля позволяют регулировать размер центрального окна, а также корректировать положение чувствительной области по оптической оси. Поддерживается частота записи до 150 Гц.

Для регистрации ионов и электронов служат ионный времяпролетный масс-анализатор iTOF и спектрометр VMI.

Станция REMI позволяет визуализировать импульсы ионов и электронов с энергиями до 50 и 500 эВ соответственно в газовой фазе. Методом спектроскопии по импульсу иона отдачи в холодной мишени (COLTRIMS – cold target recoil ion momentum spectroscopy) исследуется сложная кинематика частиц с высоким разрешением по их угловому положению и энергии. Спектрометр REMI оснащен двумя детекторами на основе микроканальных пластин с анодами задержки, что обеспечивает хорошую точность по времени и положению.

В станциях AQS и NQS для ввода пробы могут применяться игольчатое сопло, генераторы сверхзвукового молекулярного пучка, источник агрегаций частиц инертных газов, импульсный источник микроплазмы, а также система впрыска аэрозоля. В станции REMI используется система создания сверхзвуковой струи газа.

В первой половине 2020 года планируется дооснастить установку лазерами для накачки пробы: волоконным с длиной волны 1030 нм, позволяющим генерировать импульсы длительностью менее 40 фс, а также специально разработанным источником с неколлинеарным оптическим параметрическим усилением (NOPA – non-collinear optical parametric amplification) с длинами волн 1030 и 800 нм и длительностью импульсов до 400 пс и 15 фс соответственно.

* * * *

European XFEL – яркий пример эффективного международного сотрудничества. Проект был поддержан двенадцатью странами Европы, причем Россия стала вторым по величине вклада инвестором после Германии. От нашей страны в кооперации участвуют Курчатовский институт, Южный федеральный университет, Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН, а также ТИСНУМ. В условиях отставания от ведущих стран в развитии новых технологий и растущей международной изоляции участие в передовых научных проектах, подобных European XFEL, приобретает для российских ученых особое значение.

Как уже отмечалось выше, Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах обеспечивает возможности исследования динамики изменения строения вещества с недоступным ранее разрешением по времени. Это позволяет решать на новом уровне множество научно-практических задач, в том числе по созданию новых лекарственных препаратов на основе расшифровки атомной структуры биомолекул, исследованию фотосинтеза с перспективой открытия новых источников энергии, разработке новых катализаторов для промышленности, изучению наномагнетизма с целью создания новых носителей информации.

Уже в 2020 году в стэнфордском центре LCLS планируется запустить в эксплуатацию новую линию лазера на свободных электронах, который превзойдет European XFEL по временному разрешению, обеспечивая генерацию до 1 млн импульсов/с, а на 2025 год анонсирован запуск лазера с аналогичной частотной характеристикой в Шанхае (Китай). Новые лазеры создадут дополнительные возможности для передовых научных исследований, но и European XFEL, безусловно, не утратит своего значения, тем более что в его проект заложены широчайшие возможности для модернизации. ■

MOMPS

10th International Symposium

MOLECULAR ORDER AND MOBILITY IN POLYMER SYSTEMS

May 18-22, 2020
St. Petersburg, AZIMUT Hotel Saint Petersburg

TOPICS:

- Conformations, dynamics, and self-organization of macromolecules of various architectures;
- Polymer composites, nanocomposites, hybrid and meta-materials;
- Biocompatible, biomimetic, and biohybrid polymer systems;
- Theory, multiscale computer simulations, machine learning, and artificial intelligent approach in polymer science;
- Advances in synthesis of functional and smart polymers.

KEY DATES:

- **March 12, 2020 – Abstract submission**
- **March 31, 2019 – Early Bird Registration**

www.momps2020.marco.ru

ORGANIZERS AND PARTNERS:

IMC

IUPAC INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY

since 1991 Monomax®