

Atomic and Cluster Physics with Short Wavelength Radiation from Free electron Lasers

Deutsches Elektronen-Synchrotron
Notkestraße 85
22607 Hamburg

Technische Universität Berlin
Straße des 17. Juni 135
10623 Berlin

Universität Rostock
Universitätsplatz 1
18051 Rostock

Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main
Senckenbergeranlage 31
60325 Frankfurt am Main

Anlage zum Nachweis der Mittelverwendung

für das virtuelle Institut "Atomic and Cluster Physics with Short Wavelength Radiation from Free Electron Lasers", VH-VI-103,

Projektpartner DESY

Kurze Beschreibung der Antragsaktivitäten:

Nachdem im Januar 2005 erstes Lasen des Vakuum-Ultraviolet Freie-Elektronen-Laser (VUV-FEL) bei 32 nm mit Pulsenergien von 5 μJ und Pulslängen von 20-50 fs erzielt wurde [V. Ayvazyan et al. "First operation of a free-electron laser generating GW power radiation at 32 nm wavelength", Eur.Phys. J. D **37**, 297 – 303 (2006)], konnte im Verlauf des ganzen Jahres der Betrieb des FEL laufend verbessert werden, so dass zum einen mittlere Intensitäten von 40-50 μJ und Spitzenintensitäten bis 130 μJ erreicht wurden und im besonderen der Routinebetrieb deutlich verbessert werden konnte. Gleichzeitig wurde im Frühjahr 2005 die VUV-FEL Nutzeranlage mit zur Zeit vier Messplätzen aufgebaut, die im Juni 2005 in Betrieb genommen wurde und an der bis Mitte 2006 16 Nutzergruppen aus aller Welt erste Experimente durchführen. Zusätzlich werden intensive Tests verschiedener Entwicklungen und experimenteller Einbauten im Bereich der Photonendiagnostik von der VUV-FEL Photonendiagnostikgruppe bei DESY durchgeführt. Vier Messplätze stehen zur Auswahl: Beamline BL1 mit einem mittels eines Toroidspiegels erzeugten $\sim 100 \mu\text{m}$ Fokus, Beamline BL2 mit einem $\sim 25 \mu\text{m}$ Fokus, der durch einen Ellipsoidspiegel erzeugt wird, die zur Zeit noch unfokussierte Beamline BL3 und die Beamline PG2, deren Messplatz sich hinter einem von der Universität Hamburg, Gruppe Prof. Dr. Wurth, entwickelten und aufgebauten hochauflösenden Monochromator befindet. Ein zweiter Messplatz hinter diesem Monochromator ist in Planung und soll 2007 fertig gestellt werden. Bild 1 zeigt die VUV-FEL Nutzeranlage im August 2005 mit ersten Nutzerexperimenten an den Beamlines.

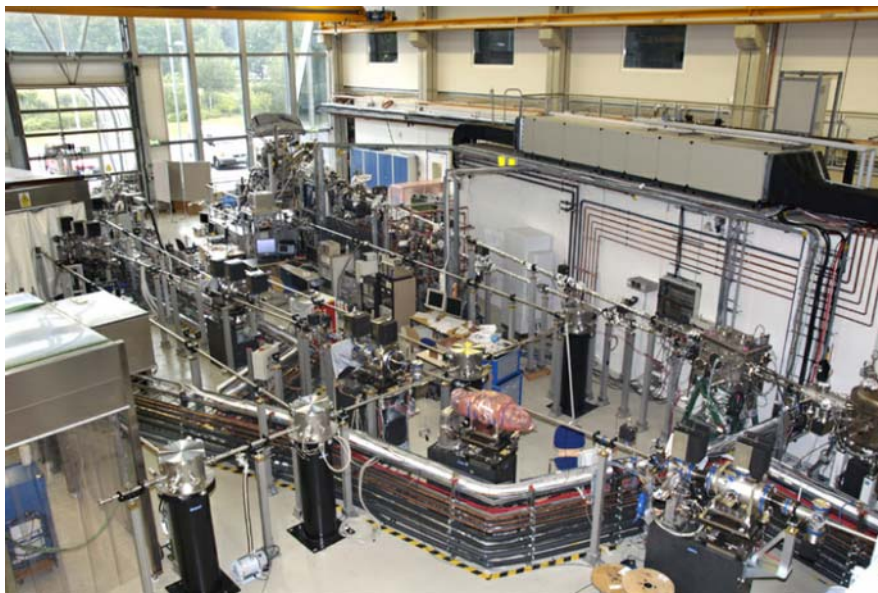


Bild 1: VUV-FEL Nutzeranlage im August 2005 mit ersten Nutzerexperimenten

Im zweiten Projektjahr des virtuellen Instituts stand im besonderen die Vorbereitung und Durchführung erster Nutzerexperimente am VUV-FEL unter Leitung der AG Möller und der AG Meiwes-Broer, die im HASYLAB Project Review 2002 genehmigt wurden und Strahlzeit zugeteilt bekamen, im Vordergrund. In mehreren vorbereitenden Treffen und durch die intensive Betreuung der Universitätsgruppen durch die beteiligten DESY Wissenschaftler konnte die sehr knapp bemessene Messzeit von ca. zwei Wochen pro Projekt sehr effektiv gestaltet und erste Forschungsergebnisse erzielt werden.

In einer Zusammenarbeit zwischen DESY und der TU Berlin wurde die Konzeption einer Fokussieroptik für eine extrem hohe Leistungsdichte weitergeführt. Erste Tests einer Spiegeloptik bestehend aus vier Spiegeln unter streifendem Strahleinfall in Zusammenarbeit mit der Gruppe P. Zeitoun, LOA, Frankreich haben gezeigt, dass Spiegeloptiken dieser Art sehr schwierig unter den Bedingungen des VUV-FELs zu handhaben sind. Aus diesem Grund wurde entschieden, für das virtuelle Institut stattdessen einen Multilayer-Spiegel zu entwerfen und anfertigen zu lassen, der die speziellen Anforderungen der Experimente, die im Rahmen des virtuellen Instituts geplant sind, gut erfüllt und besonders im Hinblick auf die kurze Laufzeit des Projekts eine interessante Alternative darstellt. Die Vorgaben aus Cluster theoretischen Überlegungen prognostizieren eine gewünschte Leistungsdichte von 10^{16} Photonen/cm². Die fokussierende Optik muss aufgrund einer benötigten Fokallänge von <200mm direkt in die Experimentkammer integriert werden. Eine intensive Zusammenarbeit zwischen DESY und der TU Berlin ist hierbei unumgänglich, um sowohl den Anforderungen einer optimalen Fokussierung als auch den Gegebenheiten der Experimente gleichzeitig genügen zu können. Angestrebt wird eine Spotgröße von <0.010mm.

Eine Schwierigkeit für alle Nutzergruppen des FEL stellt die dem SASE (self amplified spontaneous emission) inhärente Variabilität der Strahleigenschaften von Schuss zu Schuss dar. Neben der Variation der Intensität des FEL, die in einem Gasdetektor online für jeden Schuss gemessen wird, ist besonders die Änderung des Spektrums des FEL von Schuss zu Schuss ein entscheidendes Problem. Aus diesem Grund entwickeln wir ein Online-Spektrometer, das die Strahlung an Stelle eines der Beamline-Spiegel in der 0. Ordnung zu den Experimentierstationen lenkt während gleichzeitig in der 1. Ordnung das Spektrum bestimmt wird. Um den gesamten Wellenlängenbereich, welcher von den Experimenten benötigt wird, abzudecken, werden zwei Gitter mit unterschiedlicher und variabler Linienbreite benötigt. Das Design ermöglicht Auflösungen $\lambda/\Delta\lambda$ zwischen 500 und 3000.

Mit Hilfe eines Spektrometers der Universität Padua konnte intensive zweite und dritte harmonische Strahlung nachgewiesen und quantifiziert werden, Bild 2, die im Rahmen des virtuellen Instituts für Pump-Probe Experimente genutzt werden soll. Die von BESSY entwickelte Strahlteilungs- und Verzögerungsoptik (Autokorrelator) befindet sich zur Zeit im Bau und soll im Frühjahr 2007 in die VUV-FEL Nutzeranlage integriert werden, so dass sie gegen Ende der Laufzeit des virtuellen Instituts für die Pump-Probe-Messungen zwischen 1. und 3. Harmonischer des VUV-FEL, die in Zusammenarbeit mit der AG Möller geplant werden, zur Verfügung stehen wird. Der Einbau einer Halterung für geeignete Filter für die Pump-Probe Messungen wird vorgesehen. Messungen zur Charakterisierung möglicher Filtermaterialien werden durchgeführt.

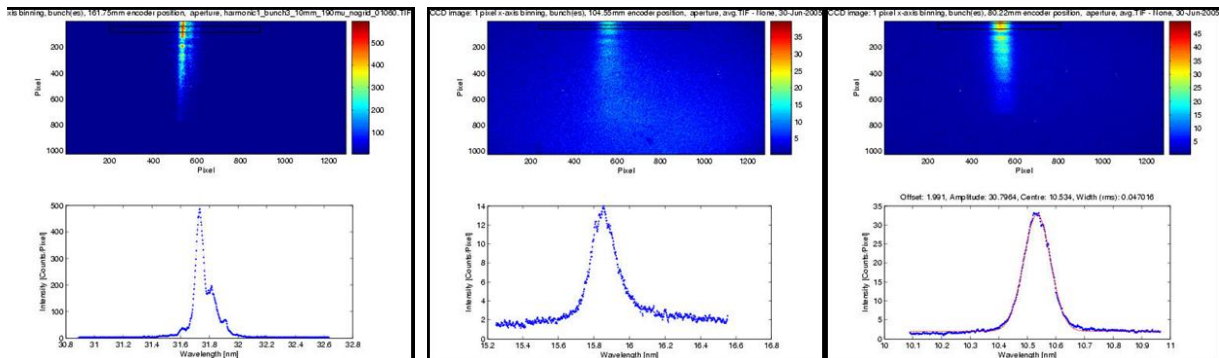


Bild 2: Spektren der Fundamentale (Einzelschuss) sowie der zweiten und dritten Harmonischen (4000 Pulse).

Im Hinblick auf die Vernetzung der am virtuellen Institut beteiligten Gruppen finden regelmäßig vor den Messzeiten vorbereitende Treffen statt und alle Gruppen haben sich intensiv an beiden Messzeiten (AG Möller, AG Meiwes-Broer) beteiligt, um gemeinsam die speziellen Experimentierprobleme am VUV-FEL zu lösen und Erfahrungen für weitere zeitlich immer sehr begrenzte Messzeiten zu sammeln. Erste Ergebnisse dieser Messzeiten wurden auch bei den beiden von DESY durchgeführten Nutzer-Workshops am 14.-15. November 2005, sowie am 26. Januar 2006 vorgestellt.

Impuls und Vernetzungsfond Virtuelles Institut der Helmholtz-Gesellschaft
Atomic and Cluster Physics with Short Wavelength Radiation
from Free Electron Lasers (Projekt VH-VI-103)

Projektkoordinator Prof. Thomas Möller, Technische Universität Berlin

Bericht des Verbundpartners Universität Rostock

Im Rahmen des Verbundprojektes sind Studien an Atomen, Molekülen und Clustern mit Licht des VUV-FEL am DESY in Hamburg durchzuführen. Die Aufgabenverteilung sieht vor, dass die Rostocker Arbeitsgruppe für die Experimente einen Molekularstrahl aus Metallclustern zur Verfügung stellt. In den ersten Strahlzeiten hat sich herausgestellt, dass der VUV-FEL, der momentan auf einer Wellenlänge von 30 nm arbeitet, im Verlauf des nächsten Jahres für kürzere Wellenlängen optimiert wird. Ausgehend von diesen Projektierungen ergab sich daraus, eine Quelle zu konzipieren, die einen intensiven Fluss von Metallclustern gebildet aus den schwereren Elementen gewährleistet. Die Wahl fiel unter anderem auf Blei und Wismut, die sowohl im Bereich von 40 eV als auch bei den projektierten 80 eV einen hohen Wechselwirkungsquerschnitt haben. Die für die Experimente vorgesehene Magnetron-Aggregationsclusterquelle ist in der Lage, diese Metalle mit einer hohen Rate zu verdampfen und so die erforderliche Targetdichte im Wechselwirkungsvolumen zur Verfügung zu stellen.

Mit Beginn des Förderjahres wurde begonnen, die mobile Metallclusterquelle zu projektieren und die zum Betrieb der Quelle und der Charakterisierung der Clustermassenverteilung notwendigen Geräte zu beschaffen. Für den Magnetronkopf und die Strom-/ Spannungsversorgung wurde auf eine kommerziell verfügbare Version zurückgegriffen. Im Gegensatz zu den von uns bislang eingesetzten Magnetron wurde hier die aktiv gesputterte Fläche stark vergrößert, um die Verdampfungsrate gegebenenfalls zu erhöhen und außerdem die Standzeit der Quelle deutlich zu verbessern. Der Aggregationsraum kann bei Bedarf bis auf LN2 Temperatur gekühlt werden. Zur Positionierung der Quelle wurde eine HV-Variante eines XY-Verschiebetisches von der mechanischen Werkstatt in Rostock gebaut, die sich schon an anderen Experimenten bewährt hat. Für die Zuführung des Reaktionsgases werden zwei Gasflussregler eingesetzt, mit denen der Druck in der Aggregationsquelle und die Zusammensetzung der Puffergase Argon und Helium variabel eingestellt werden kann. Neben dieser Möglichkeit die Größenzusammensetzung zu be-

einflussen, kann der Abstand des Magnetronkopfes von der Austrittsdüse in einem weiten Längenbereich eingestellt werden. Dies wird durch einen UHV Manipulator realisiert, der einen Verschiebeweg von 20 cm zulässt. Momentan arbeiten wir daran, die Charakteristik des effusiven Strahl zu verbessern, indem wir am Düsenausgang eine Aerodynamische Linse einsetzen. Diese bislang in der Aerosolforschung häufig eingesetzte Düse wurde bislang nur für große Teilchen verwendet. Erste Vorexperimente, die wir an einer anderen Clusterquelle durchgeführt haben, deuten aber an, dass man dieses Konzept auch für deutlich kleinere Nanoteilchen verwenden kann.

In der ersten Kammer des Experiments wird eine Turbomolekularpumpe (1600 l/s) eingesetzt, die mit einer Boosterpumpe ($250 \text{ m}^3/\text{h}$) und einer Vorvakuum Pumpe ($30 \text{ m}^3/\text{h}$) verbunden ist. Um die geforderte Ölfreiheit am VUV-FEL zu garantieren, wird als letzte Stufe eine Scrollpumpe verwendet. In der zweiten differentiellen Pumpstufe befindet sich die Clusteranalyseeinheit. Sie besteht aus einem statischen Quadrupolmassenselektor, mit dem der geladene Anteil des Clusterstrahls während des Experiments kontrolliert werden kann. In ersten Vorexperimenten hat sich gezeigt, dass die Quelle bei Verwendung von Silber Teilchen einer mittleren Größe von 5 nm mit hoher Intensität liefert. Teilweise konnten Strahlströme von mehr als 100 pA nachgewiesen werden. Durch eine Variation in der Gaszusammensetzung und im Abstand des Magnetrons zur Düse ist es möglich, die Größenverteilung in einem weiten Bereich zu variieren. Es ist in naher Zukunft geplant, die einzelnen Komponenten in die mobile Clusterapparatur zu integrieren, die Quelle für den Einsatz am VUV-FEL zu optimieren und erste Vorexperimente mit einem optischen Kurzpulslasersystem durchzuführen.

Erste Untersuchungen an Metallclustern mit VUV-FEL Strahlung sind im Rahmen der nächsten Messzeit eingeplant. Dazu wird das vorhandene System durch ein bereits vorhandenes Reflektron-Flugzeitmassenspektrometer ergänzt. Um hier möglichst flexibel agieren zu können, sollen auch vergleichende Messungen an verdampftem C_{60} durchgeführt werden. Für die Experimente werden wir die Anlage am Strahlrohr BL1 installieren, das einen Fokusdurchmesser von $100 \mu\text{m}$ zu Verfügung stellt.

Zwischenbericht

Virtuelles Institut

'Atomic and Cluster Physics with Short Wavelength Radiation from Free Electron Lasers' Kennziffer VH-Vi-103

Arbeitsgruppe Prof. Dr. T. Möller, TU Berlin

Im Jahr 2005 kam es zu einer sehr intensiven Zusammenarbeit zwischen den beteiligten Arbeitsgruppen im Virtuellen Institut 'Atomic and Cluster Physics with Short Wavelength Radiation from the Free Electron Laser'. In einem Arbeitsgespräch des Virtuellen Instituts trafen sich am 23. Mai 2005 die beteiligten Arbeitsgruppen AG Dörner (Univ. Frankfurt), AG Meiwes-Broer (Univ. Rostock), AG Möller (TU-Berlin) sowie als Gastgeber und federführendes Mitglied Hasylab (DESY) vertreten durch Frau Elke Plönjes. Dort berichteten die Arbeitsgruppen über die erzielten Fortschritte, es wurden Konzepte für eine Mikrofokus Optik diskutiert und die Messzeiten der verschiedenen Arbeitsgruppen am FEL koordiniert. Die Arbeitsgruppe an der TU-Berlin stellt zum Juni Herrn Dipl. Phys. Heiko Thomas auf eine Doktorandenstelle des VI ein. Herr Thomas übernahm als erste Aufgabe, mit der Expertise der Arbeitsgruppe der TU, eine Kühlfalle für das von der Univ. Rostock aufgebaute Experiment zur Untersuchung massenselektierter Cluster aufzubauen. Die Arbeitsgruppen aus Rostock und Berlin führten im August und im Oktober gemeinsam Experimente am VUV-FEL durch, bei denen diese Kühlfalle zu Einsatz kam. Es stellte sich heraus, dass bei Betrieb mit flüssigem Helium die Falle den Partialdruck des Restgases soweit senken kann, dass Photoelektronenspektren von massenselektierten Clustern aufgenommen werden können. Dies war ein wichtiger experimenteller Durchbruch für zukünftige Untersuchungen. Auch zwischen der AG in Berlin und der AG in Frankfurt kam es zu einer sehr intensiven Zusammenarbeit. Die Berliner Gruppe baute im Jahr 2005 einen COLTRIMS-Detektor auf, wobei die Hilfe der Frankfurter Gruppe unerlässlich war. Insbesondere entwickelte Herr Foucar aus Frankfurt wesentliche Teile der Software, die zur Datennahme mit dem COLTRIMS-Detektor notwendig war. Außerdem wurden im Rahmen des VI Spezialelektronik

Komponenten der Univ. Frankfurt an die AG der TU ausgeliehen. Der Coltrims Detektor konnte im Herbst bei einer Messzeit am Strahlrohr BW3 (HASYLAB) erfolgreich getestet werden. Die Frankfurter Gruppe half ferner bei dem Aufbau eines Detektors zur Bestimmung der Intensität der FEL-Strahlung.

In Zusammenarbeit mit DESY (Frau Plönjes, Frau Kuhlmann, Herr de Castro als Gastwissenschaftler) wurde die Konzeption einer Fokussieroptik für extrem hohe Leistungsdichten fortgesetzt. Ausserdem wurde eine Publikation über einen Pump-Probe Schema für den FEL fertiggestellt.

Die Clusterapparatur der Berliner AG wurde im Dezember 2005 für Experimente am VUV-FEL nach Hamburg gebracht. Hier wurde auch der FEL Beamline – Experiment Übergang in Zusammenarbeit von DESY und TU mit einer Kollimator- und Blendeneinheit verbessert. Anschließend wurde mit sehr erfolgreichen Experimenten zur Photoionisation bei sehr hohen Leistungsdichten begonnen. An einem Teil dieser Experimenten nahmen die AGs aus Rostock und Frankfurt sowie DESY teil und lieferten für die Messungen sowie Interpretation der Daten wichtige Beiträge.



Prof. Dr. Reinhard Dörner
Phone: 049 69 798 47003
Fax: 049 69 798 47024
email: doerner@atom.uni-frankfurt.de

JWG-Universität Frankfurt
Institut für Kernphysik
Max-von-Laue Str. 1
D-60438 Frankfurt am Main

31.01.2006

Nachweis der Mittelverwendung des Virtuellen Instituts VH-VI-103 - AG-Dörner, Institut für Kernphysik Frankfurt -

Involvierte Mitarbeiter bei den Projekten des Virtuellen Instituts:

Gruppenleiter: Prof. Dr. Reinhard Dörner
Postdoc 1: Dr. Achim Czasch
Postdoc 2: Dr. Till Jahnke
Doktorand 1: Dipl. Phys. Lutz Foucar
Doktorand 2: Dipl. Phys. Markus Schöffler

Zwischenbericht der Doktorarbeit: Dipl. Phys. L. Foucar

In naher Zukunft sollen die Zerfalls- bzw. Ionisationsmechanismen von großen atomaren Verbänden (letztendlich von lebensbestimmenden Biomolekülen) verstanden werden: Fundamentale Systeme brechen in einer ganz speziellen Form auf, und die Fragmente können mit ihren nächsten Nachbarn reagieren. Dies ist von höchster Bedeutung, denn der Aufbruch von großen Molekülen und Molekülketten durch Teilchen- oder Lichteinstrahlung passiert ständig und überall in unserer Umwelt: Er findet statt in Ottomotoren und Kraftwerken (Energiegewinnung), er passiert in den oberen Schichten unserer Erdatmosphäre (Schäden der Ozonschicht) und in unserem Körper (Zerstörung der DNS, Strahlungsschäden).

In welche Fragmente spaltet also solch ein Makromolekül unter dem Einfluss von Strahlung auf? Unter welchen (Zwischen-)Winkeln müssen dabei die Teilchen vorzugsweise emittiert werden damit sie mit ihren nächsten Nachbarn reagieren können? Welcher (korrelierten) Dynamik unterliegen die Konstituenten ein solches Vielteilchensystems? Um diese wichtigen Fragen der verschränkten Bewegung vieler Körper zu beantworten soll mit Hilfe einer hochintensiven Strahlungsquelle (dem VUV-FEL) ein solcher Vielteilchenaufbruch an einem komplexen Target herbeigeführt und untersucht werden: Bei der Vermessung dieses Multifragmentationsprozesses müssen dann möglichst viele „Bruchstücke“ (Elektronen, Ionen und Molekülionen) gleichzeitig nachgewiesen werden. Dies ist problematisch, da orts- und zeitauflösende Detektoren immer mit einer Totzeit behaftet sind in der sie nach dem Nachweis eines Teilchens für eine bestimmte Zeit und in einem bestimmten Umkreis nicht aufnahmefähig sind. Um diese Schwierigkeiten zu beherrschen, werden für die ersten Versuche kleine Van-der-Waals- oder auch kovalentes Cluster als Untersuchungsobjekt ins Auge gefasst.

Aber auch hierbei liegt die Herausforderung nun darin, die vielen Teilchen mit möglichst vollem Raumwinkel (4π) nach deren Anfangsimpuls (also der Kenngröße für Bewegungsvorgänge) zu spektroskopieren. Die in Frankfurt mitentwickelte Technik der COLd Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy (COLTRIMS) stellt ein Reaktionsmikroskop dar, das dies zu leisten vermag. Jedoch sind dabei etwa 10 bis 100 Ereignisse auf den großflächigen Detektoren¹ zu erwarten, die nahezu gleichzeitig in einem kurzen Zeitraum ausgelesen werden müssen. Der in Frankfurt ansässige Doktorand (BATIIa/2) wurde deswegen mit dem Aufbau, dem Test und der Programmierung einer

¹ Es handelt sich um sogenannte Vielkanalglasplatten mit Verzögerungsdrahtauslese zur Ortsbestimmung.

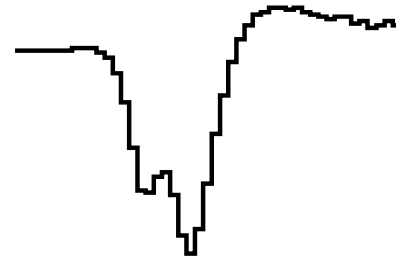
schnellen Datenauslese auf der Basis eines Vielkanal-Transientenrekorders (Acqiris Flash-ADC System) betraut: Siehe Abbildung 1



Abbildung 1 (links): Der Acqiris Flash-ADC als Steckkarte in einer Versorgungseinheit. Die Einschubkarte hat 4 Eingänge und die Bin-Breite eines Kanals beträgt 1 ns. Durch Schwerpunktbildung ist eine Auflösung im Sub-Nanosekundenbereich möglich.

Die Auslese ist deswegen so komplex, da zu einem Teilchen mehrere Pulse der Detektoren gehören, die teilweise mit anderen Pulsen anderer Teilchen überlappen können (siehe Abbildung 2).

Abbildung 2 (rechts): Eine typische Doppelpulsform, die per Offline-Analyse in zwei Einzelpulse zerlegt und mit anderen Pulsen zu einem Ereignis zusammengefügt werden muss.



Die komplizierte Analyse der Kurzzeitpuls wurde daher in drei Schritte unterteilt:

1. Level: Unterdrückung des Verstärker-Rauschens und der DC-Offsets im Aufnahmeprogrammteil
2. Level: Einfache Schwerpunktbildung der gefilterten Signale mit Hilfe von 10 bis 20 Stützpunkten (Binsize = 1 ns) online. Hier wurde bereits eine Auflösung von 150 ps erreicht.
3. Level: Offline Analyse der vorsortierten Pulsstrukturen durch ein iteratives Fitverfahren mit Hilfe von Standardpulsformen (basierend auf einer Mittelung von 1000 bis 2000 Ereignissen).

Die Punkte 1 und 2 konnten soweit realisiert und getestet werden. Für den Punkt drei stellen die Geschwindigkeit des Rechenalgorithmus', eine mögliche Ortsabhängigkeit der Standardpulse und Nichtlinearitäten der vorgeschalteten Verstärkereinheiten noch ein Problem dar an dem aktuell gearbeitet wird. Mittelfristig soll eine Zeitauflösung von 80 ps erreicht werden. Es wurde eine Zusammenarbeit mit dem Hersteller des Flash-ADCs (Acqiris) in der Schweiz aufgebaut: Als Resultat werden die Elektronikmodule in naher Zukunft mit einem frei rekonfigurierbarem Logik-Chip (FPGA) ausgestattet, der es ermöglichen soll, Level 2 und 3 miteinander zu kombinieren.

Die Planung des Impulsspektrometers zum koinzidenten Nachweis von Elektronen und Ionen wurde von Dr. A Czasch und Dr. T. Jahnke durchgeführt. Bei diesem Spektrometer handelt es sich im Prinzip um eine Ionenspektrometer welches mit einem Elektronenspektrometer überlappt: Beide teilen sich dasselbe elektrische Abzugsfeld. Dieses ist schwach (einige V/cm) und führt die Teilchen auf separate ortsauflösende Detektoren (80 mm Durchmesser). Ein Magnetfeld, welches dem elektrischen Feld parallel überlagert wird, sorgt dafür, dass aufgrund der Lorentz-Kraft die höher energetischen Elektronen das Spektrometer nicht verlassen können. Ihre Trajektorien beschreiben damit Gyrationbahnen im Impulsspektrometer. Das Reaktionsmikroskop basiert damit auf einer Messung des Auftreffortes der Teilchen auf den Detektoren und der Flugzeit der Teilchen (Time-Of-Flight TOF) zu den Detektoren. Die beiden Teilspektrometer wurden nach der Wiley-McLaren-Geometrie ausgelegt: Diese vermag die Ausdehnung des Targets in Flugzeitrichtung zu fokussieren. Elektrooptische Linsen zur Ortsfokussierung konnten aufgrund der hohen Teilchenenergien nicht effektiv realisiert werden.