

## 7

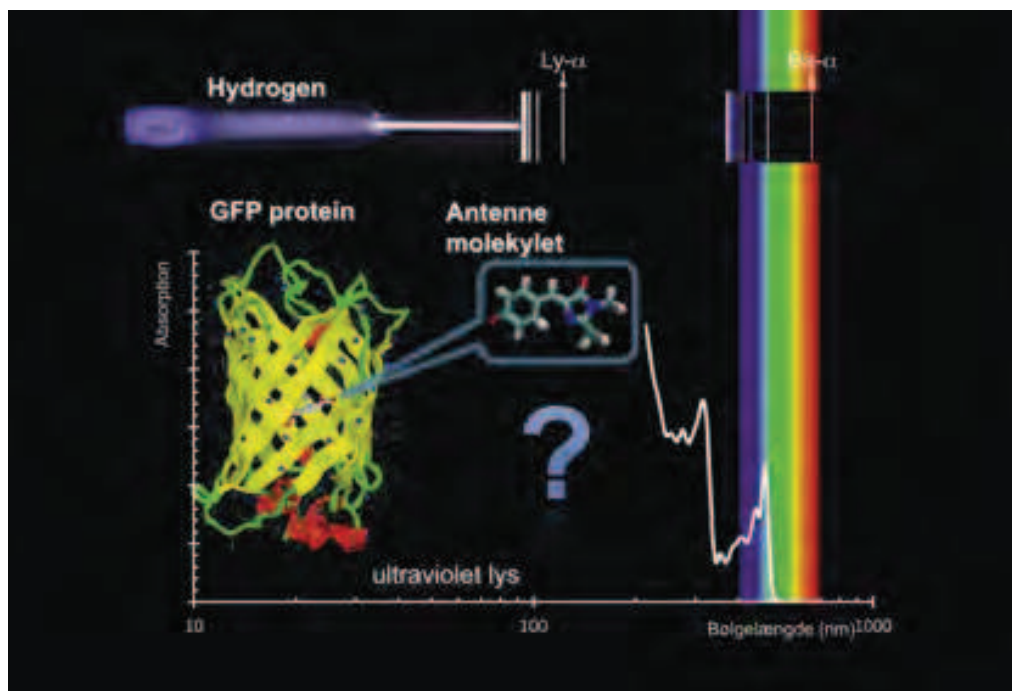
# MOLEKYLER SET MED ”TUNGE” FOTONER

PERSPEKTIVER FOR STUDIER AF MOLEKYLER  
MED HØJENERGI FOTONER FRA ASTRID2  
SYNKROTRONSTRÅLINGSKILDEN

---

**Af**  
**LARS HENRIK ANDERSEN**  
PROFESSOR, DR. SCIENT.,  
INSTITUT FOR FYSIK  
OG ASTRONOMI,  
AARHUS UNIVERSITET

Med nye UV-lyskilder er vi i dag i stand til at udforske atomer og molekyler i nye spektralområder. En større UV-facilitet er under opbygning ved synkrotronstrålingsfaciliteten ASTRID2 på Aarhus Universitet. Her vil molekylære ioners reaktion på UV-bestråling blive studeret under vakuumbetingelser.



Figur 1  
Hydrogenatomets absorptionslinjer og absorptionsspektret af det isolerede antennemolekyle fra det grønne fluorescerende protein (GFP). Spektret af GFP molekylet er vist i det synlige område, mens dets egenskaber i UV-området endnu ikke er kendt.

## UV-lys

I år er det 100 år siden, at Niels Bohr publicerede sin model for atomet med en beskrivelse af, hvordan elektronerne i deres bevægelse omkring kernen har bestemte kvantiserede energier. Disse energitilstande er bestemmende for materialers egenskaber; planters blade er f.eks. grønne, fordi klorofyl i bladene primært absorberer/fjerner røde og blå lyskvanter, og ikke i samme grad lyskvanter fra det grønne område af solens spektrum — det grønne lys forsvinder derfor *ikke* i samme grad.

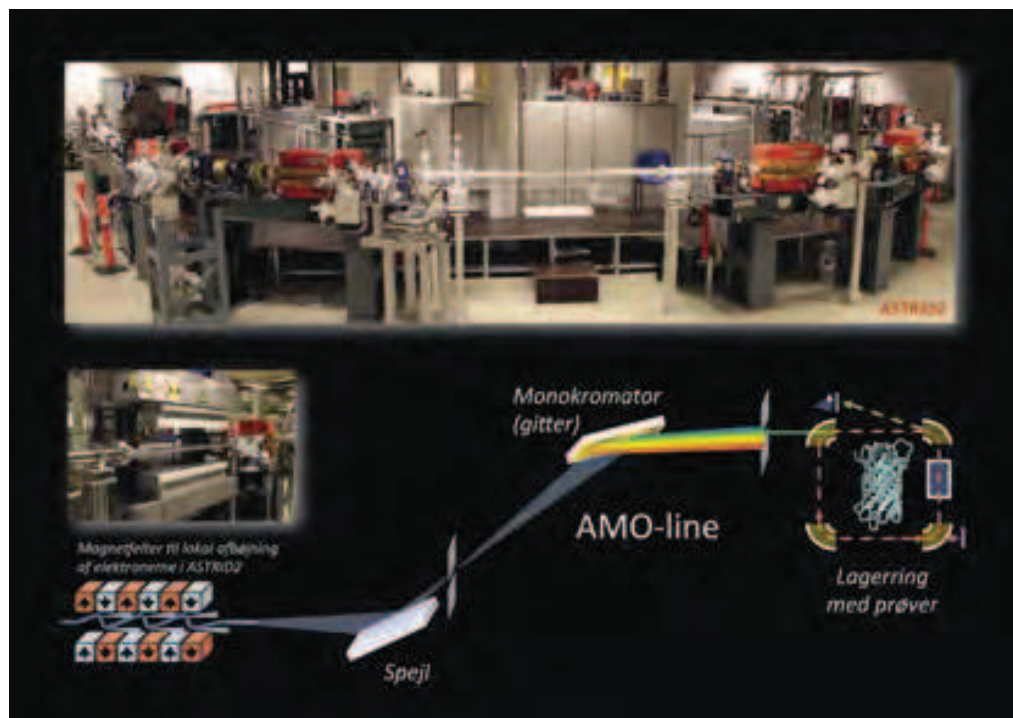
I 1913 kortlagde Niels Bohr egenskaber af det simpleste atom, hydrogenatomet. Siden da er kvantemekanikken blevet udviklet som redskab til nøjagtigt at beskrive atomer og molekyler. I princippet er vi i stand til at beskrive alle molekyler på denne måde, men jo større de er, jo sværere er det at beregne deres egenskaber. Selv ved at benytte de kraftigste computere i verden, er vi i dag ikke fuldt ud i stand til at beregne de kvantemekaniske egenskaber af stoffer med mere end ca. 50-100 atomer. Derfor bruger vi eksperimenter for at kortlægge egenskaberne af atomer og molekyler — ganske som man gjorde det på Bohrs tid, om end med langt mere avanceret apparatur i dag.

Synkrotronstrålingsfaciliteten ASTRID2, som nu er operationel ved Aarhus Universitet, muliggør denne type atomfysiske eksperimenter. ASTRID2

producerer intens, energirig UV-lys, hvormed man effektivt kan undersøge de store molekyler.

UV-lys har kortere bølgelængde, og dermed højere energi, end den synlige del af lysspektret. Det kan forårsage voldsomme skader i biologisk væv, fordi de enkelte fotoner i lyset har tilstrækkelig energi til at bringe molekyler i meget reaktive energitilstande. Et af de mest kendte fænomener er solskoldningen; derfor oplyses UV-indekset dagligt på DMI's hjemmeside. UV-lys har også betydning i helt andre områder, som f.eks. i atmosfæren og i det interstellare rum, hvor molekyler bombarderes med lys fra omkringliggende stjerner. UV-fotoner er mere energirige end fotoner af synligt lys, og derfor har vi i titlen kaldt dem 'tunge' fotoner. Formålet med vore studier er at undersøge, hvad der sker med molekyler, når de rammes af UV-fotonerne. Vi ønsker at forstå detaljerne af reaktionerne, der bliver igangsat af energirig UV-lys. Derfor udfører vi kontrollerede forsøg, hvor molekylerne er isolerede fra omverdenen i et vakuum. Et nyt apparatur hertil er, med støtte fra Carlsbergfondet, under opbygning ved den nye synkrotronstrålingsfacilitet ASTRID2. Vi kan her både opbevare og undersøge enkelte molekyler, samt bestråle dem med UV-lys. Lyset kommer fra hurtige elektroner i ASTRID2-ringen, når de udsættes for kraftig acceleration, den såkaldte synkrotronstråling. I ASTRID2 får en række alternerende mag-

“  
**Selv ved at benytte de kraftigste computere i verden, er vi i dag ikke fuldt ud i stand til at beregne de kvantemekaniske egenskaber af stoffer med mere end ca. 50-100 atomer.**  
”



Figur 2  
ASTRID2 lagringen (øverst)  
og AMO-line skitterset  
nedenfor. Kraftige magnetfelter  
forøger UV-intensiteten og den  
rette bølglængde (fotonenergi)  
udvælges med en monokromator.  
Molekylerne, der bestråles, holdes  
fanget i en separat lagring.



**UV-lys har kortere bølglængde, og dermed højere energi, end den synlige del af lysspektret. Det kan forårsage voldsomme skader i biologisk væv, fordi de enkelte fotoner i lyset har tilstrækkelig energi til at bringe molekyler i meget reaktive energitilstande.**



netfelter, en såkaldt undulator, elektronerne til at svinge frem og tilbage og derved udsende ekstra meget synkrotronstråling. Vi kan bestemme synkrotronstrålingens bølglængde ved at justere indstillingerne på undulatoren og en monokromator (gitter), som sidder på vejen ud til eksperimentet.

I modsætning til andre lyskilder, som f.eks. kommercielle lasere, er ASTRID2's UV-stråling ikke bare intens og energirig, den har også en variabel bølglængde. ASTRID2 leverer således lys i et stort set udforsket bølglængde-område, som har stor betydning for bl.a. fundamentale fysiske processer, naturligt forekommende plasmaer og reaktion på bestråling af biologiske systemer. Intensiteten af lyset vil være tilstrækkelig høj til at man kan foretage kontrollerede eksperimenter: Isolerede molekyler i vakuum absorberer UV-lyset og reagerer derefter på den øgede indre energi, der følger med absorptionen af lyset.

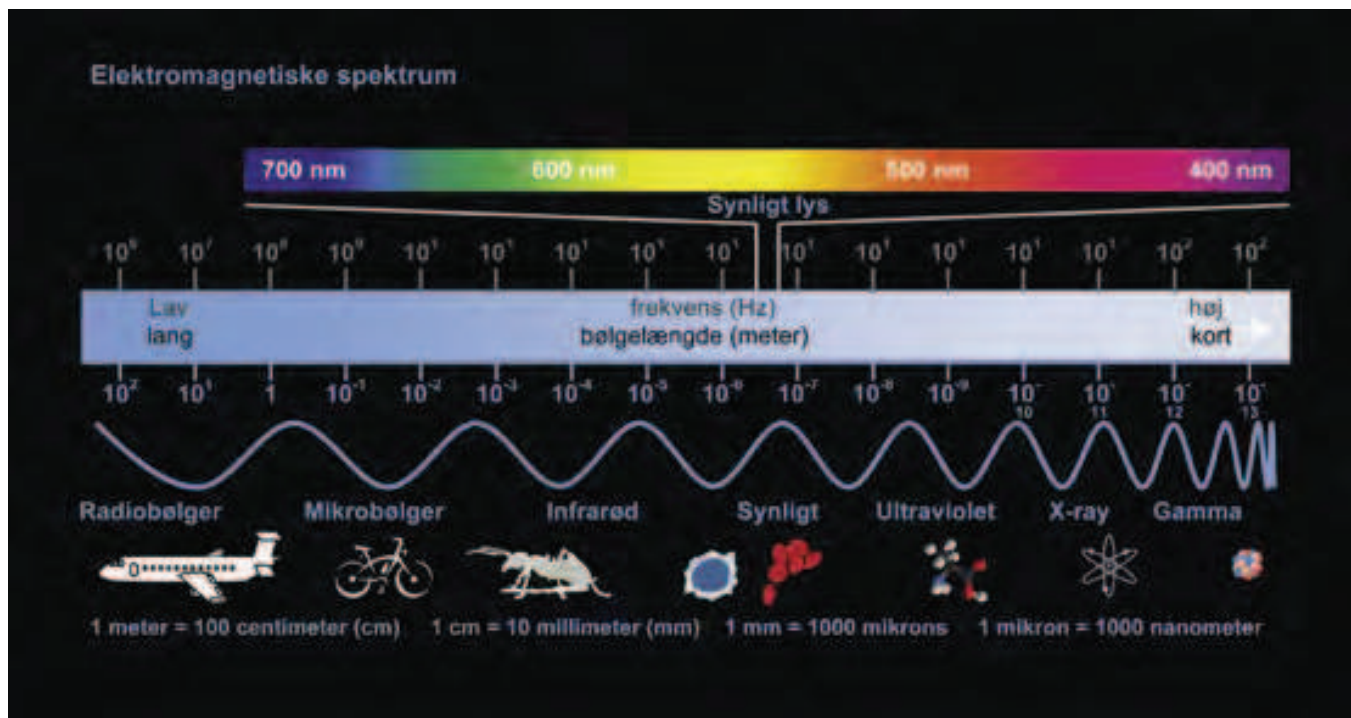
#### Isolerede ioner under vakuumbetingelser

Vi har valgt at fokusere vore studier på elektrisk ladede molekyler; de molekyllære *ioner*. Det giver en række fordele, fordi man kan manipulere ioner med elektriske og magnetiske felter. Vi kan f. eks. accelerere molekyllære ioner og lave masseanalyse ved hjælp af en magnet; vi ved således, hvad vi

studerer. Det giver os også mulighed for at lagre molekyle-ionerne i en elektrostatisk lagring før, under og efter bestråling med UV-lys, hvilket giver en række afgørende eksperimentelle fordele. Før bestrålingen kan vi udvælge ioner med præcise egenskaber, som f.eks. masse, ladning og energi. Under bestrålingen kan molekylerne blive slået i stykker af de energirige UV-fotoner, men vi kan stadig måle på alle fragmenter af molekylet, fordi de holder stort set samme retning som det oprindelige molekyle i ringen. Ved at lagre ionerne kan vi således følge deres skæbne over tid. Nogle molekyler reagerer ikke med det samme på den energi, de optager under bestrålingen. Ved at holde dem fangne i lagringen kan vi over tid observere dem og være sikre på at opdage alle reaktioner, uanset hvilket tidspunkt de måtte komme på.

Under bestrålingen med UV-lys holdes molekyle-ionerne i vakuum i den elektrostatiske ring. Tætheden er  $10^{14}$  gange lavere end ved atmosfæretryk! Derved undgår vi uønskede vekselvirkninger med omgivelserne.

Inden vi bestråler dem, kan vi også fryse molekylerne i en kold fælde — også bygget med støtte fra Carlsbergfondet. Når molekylet er ”frossent”, har vi bedre styr på atomernes bevægelse i molekylet og dermed molekylets form.



Figur 3

Det elektromagnetiske spektrum indeholder som en lille del det synlige område (rød til blåt). Nederst vises eksempler på størrelsen af bølgelængden i spektret.

### Målestation ved ASTRID2

Konstruktionen af den eksperimentelle facilitet ved ASTRID2 er i fuld gang. Nye forskningsinitiativer i forbindelse med UV-faciliteten (kaldt AMO-linje) og den nye lagring for molekylære ioner omfatter:

**Fundamentale molekylære processer**, f.eks. hvordan energi bliver fordelt og udvekslet mellem elektroner og atomkerner i et molekyle. ASTRID2 leverer fotoner, hvis energi passer perfekt til de indre energitilstande i molekyler. Når molekylets energi er i kernebevægelsen, kan vi opfatte den som varme, som vi ikke kan drage megen nytte af. Når energien til gengæld er i elektronernes bevægelse, kan den gøres 'nyttig' i form af elektrisk strøm og til kemiske reaktioner. Fordelingen af energi i de to former kan studeres på AMO-linje. Vi ønsker at forstå, hvordan naturen styrer energien derhen, hvor den kan udnyttes. Vi vil måske en dag selv være i stand til at fortælle et molekyle præcist, hvordan det skal benytte eller gemme den energi, som det får af UV- eller synligt lys.

**Biofysik**, f.eks. hvordan molekylerne i vores øjne absorberer lys. Dette kan vi nu studere for helt nye områder af lys-spektrret. Derudover kan vi undersøge UV-strålingens effekt på stabiliteten af DNA-molekylet.

**Interdisciplinære anvendelser** med forskningsprogrammer inden for atmosfærefysik, astrofysik og kemi (nøgleord: Reaktionshastigheder og fragmenteringsmønstre, vandklynger, Poly Aromatiske Hydrocarbon (PAH) forbindelser, interstellar fysik).



*Når molekylets energi er i kerne-bevægelsen, kan vi opfatte den som varme, som vi ikke kan drage megen nytte af. Når energien til gengæld er i elektronernes bevægelse, kan den gøres 'nyttig' i form af elektrisk strøm og til kemiske reaktioner.*

