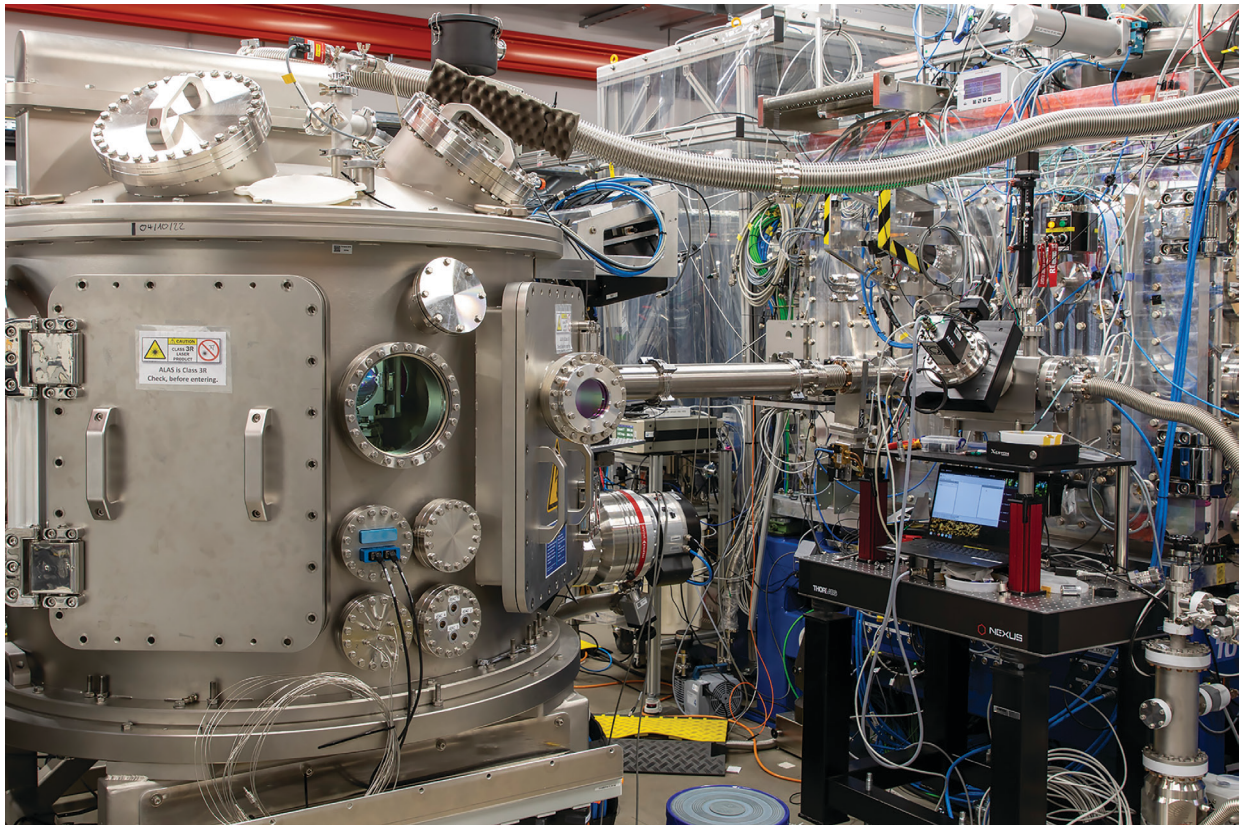


Neue Einblicke in ein Schlüsselmaterial für Planetenphysik, Fusion und Materialforschung

Flüssiger Kohlenstoff

DOMINIK KRAUS | ULF ZASTRAU



Links im Bild ist die Interaktionskammer IC2 am HED-HIBEF-Instrument zu sehen. In diese Vakuum-Experimentierkammer wird der DiPOLE 100-X Laser eingekoppelt, der den Kohlenstoff komprimiert, zusammen mit einem ultrahellen Röntgenpuls aus dem SASE2-Undulator des European XFEL. Dieser Röntgenpuls kommt von rechts durch das horizontale Rohr in die IC2-Kammer. Er wird an der heißen und komprimierten Kohlenstoffprobe gestreut und erzeugt auf einem in der Kammer hängenden Detektor ein Beugungsbild, das die innere Struktur des Kohlenstoffs widerspiegelt (Bild: European XFEL).

Mit Hilfe der ultrahellen Röntgenpulse des European XFEL und einem speziellen Hochenergie-laser konnte die Struktur von flüssigem Kohlenstoff bei Drücken von über einer Million Atmosphären und Temperaturen von etwa 7000 K bestimmt werden. Dieser Ansatz offenbarte eine komplexe Flüssigkeit mit einer wasserähnlichen Struktur und im Mittel vier benachbarten Atomen um jedes zentrale Kohlenstoffatom.

This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Kohlenstoff ist eines der häufigsten Elemente im Universum. Es ist zentral für den Aufbau allen Lebens auf der Erde und kommt in den unterschiedlichsten Formen – als Graphit, Diamant, amorph, Kohlefasern, Schaum oder Kohlenstoffnanoröhren – in vielen

technischen Anwendungen zum Einsatz. Der flüssige Aggregatzustand von Kohlenstoff ist allerdings bisher weitestgehend unbekannt [1]. Das liegt daran, dass Kohlenstoff unter Normaldruck bei Temperaturerhöhung sublimiert und direkt in die Gasphase übergeht. Erst bei

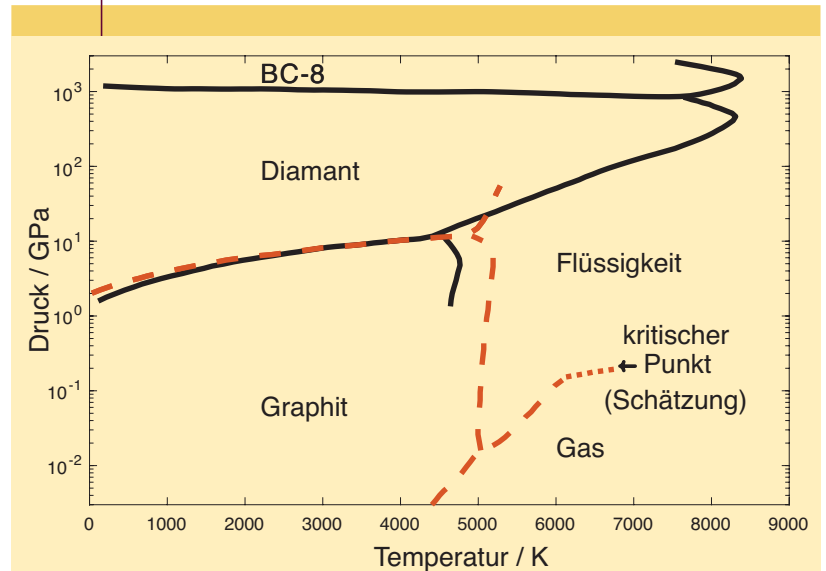
Drücken von über 100 bar kann Kohlenstoff als Flüssigkeit bestehen [2, 3]. Dies klingt zunächst nicht extrem hoch, jedoch gibt es kein gängiges Material, das unter diesen Bedingungen eine höhere Schmelztemperatur als Kohlenstoff aufweist – mindestens 4500 K (Abbildung 1). Somit gibt es keinen Druckbehälter, in dem flüssiger Kohlenstoff auf der Erde eingeschlossen werden könnte.

Ganz anders verhält es sich im Inneren großer Planeten. Dort herrschen im Zentrum Drücke von mehreren Millionen Erdatmosphären, und auch die Temperaturen erreichen viele tausend Grad Celsius – ein Beispiel für Materie bei sogenannten „Hochenergiedichte-Bedingungen“ (High Energy Density, HED), bei denen die grundlegende Physik bisher nur unzureichend verstanden ist [4, 5]. Die Größe der Planeten ist entscheidend für die Existenz von flüssigem Kohlenstoff. Im Inneren unserer Erde sind die Temperaturen wahrscheinlich gerade nicht hoch genug, um flüssigen Kohlenstoff zu erzeugen, sodass Diamanten entstehen, die durch Vulkanismus auch hin und wieder an die Oberfläche gelangen. In größeren Planeten wie Uranus, Neptun, Saturn und Jupiter, oder auch den unzähligen Supererden oder Mini-Neptuns, die außerhalb unseres Sonnensystems nachgewiesen wurden, kann Kohlenstoff höchstwahrscheinlich in flüssiger Form bestehen. Alles deutet darauf hin, dass flüssiger Kohlenstoff metallisch ist und eine hohe elektrische Leitfähigkeit aufweist. Damit kann Kohlenstoff bei entsprechendem Vorkommen im Inneren der Planeten auch bei der Erzeugung von planetaren Magnetfeldern eine Schlüsselrolle spielen.

Neben der Bedeutung für die Planetenphysik tritt flüssiger Kohlenstoff als kurzlebiger Übergangszustand bei technischen Prozessen auf, die entsprechende Druck- und Temperaturbedingungen erreichen. Beispielsweise bei der Erzeugung von Kohlenstoffnanoröhren, Nanodiamanten oder weiteren Kohlenstoffformen wie dem amorphen Q-Carbon oder der bisher nur vorhergesagten BC-8-Struktur. Letztere soll bei Drücken von über 10 Millionen bar (10^3 GPa) entstehen und könnte, wie auch Diamant, unter Normalbedingungen metastabil sein [6, 7]. Sollte das der Fall sein, wäre BC-8-Kohlenstoff wahrscheinlich ähnlich hart wie Diamant, aber gleichzeitig, durch die Abwesenheit von Spaltbarkeitsflächen (Cleavage Planes), deutlich weniger spröde.

Der Fest-Flüssig-Phasenübergang von Kohlenstoff ist außerdem entscheidend für aktuelle Konzepte der Trägheitsfusion, oft kurz Laserfusion genannt. Im Dezember 2022 wurde an der National Ignition Facility (NIF) in den USA mit Hilfe von Lasern zum ersten Mal ein brennendes Plasma im Labor erzeugt, das mehr Energie generiert hat, als durch die Laser in das Plasma eingebracht wurde [8]. In diesen Experimenten ist der Deuterium-Tritium-Fusionsbrennstoff von einer Diamanthülle umgeben, die im ersten Schritt knapp über

ABB. 1 PHASENDIAGRAMM DES KOHLENSTOFFS



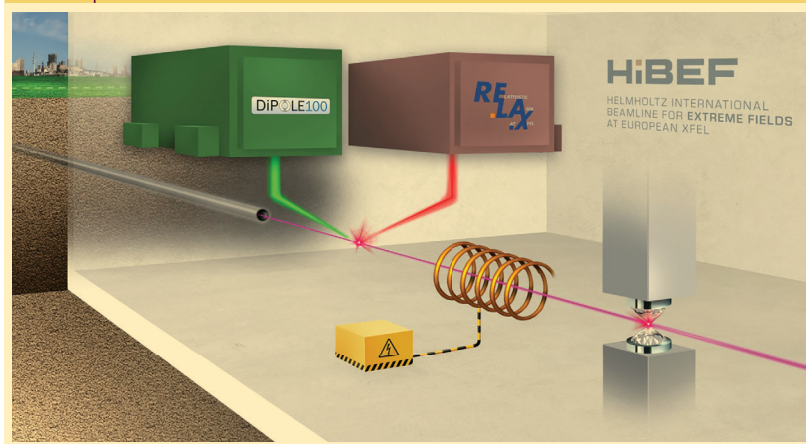
Die Modelle des Phasendiagramms von Kohlenstoff (Bild: [1-3]) zeigen, dass flüssiger Kohlenstoff nur bei großem Druck entstehen kann. Zugleich ist die Schmelztemperatur enorm hoch. Im Feststoff ist Graphit die stabile Form unter Normalbedingungen, bei höheren Drücken dann Diamant und ab dem etwa zehnmillionenfachen Atmosphärendruck die bisher nur vorhergesagte BC-8-Struktur von Kohlenstoff.

den Schmelzpunkt gebracht werden muss. Ist die Temperatur zu hoch, gelangt zu viel Entropie in das System, und der Brennstoff lässt sich nicht mehr effizient komprimieren. Ist die Temperatur zu niedrig, bleiben feste Strukturen bestehen und die resultierenden Dichteinhomogenitäten führen im weiteren Verlauf des Prozesses zu hydrodynamischen Instabilitäten, welche die Zündung des Fusionsplasmas verhindern.

Ein besseres Verständnis der flüssigen Form des Kohlenstoffs ist folglich erstrebenswert. Nach den neuesten Modellen weist Kohlenstoff, ähnlich wie Wasser, eine komplexe Struktur auf, die zu interessanten Eigenschaften führen kann. Es ist vorhergesagt, dass flüssiger Kohlenstoff eine tetraedrische Struktur zeigt. Ein zentrales Kohlenstoffatom ist also im Mittel von vier nächsten Nachbaratomen umgeben. Die meisten anderen „simplen“ Flüssigkeiten haben eine deutlich höhere Koordinationszahl.

Diese Eigenschaften des flüssigen Kohlenstoffs lassen sich experimentell jedoch nur schwer untersuchen, da flüssiger Kohlenstoff nur für sehr kurze Zeit im Labor erzeugt werden kann. Eine Möglichkeit sind lasergetriebene Schockwellen, die für wenige Nanosekunden die nötigen Bedingungen erzeugen können. Um bei solchen Experimenten ins Innere der Probe schauen zu können, wird hochenergetische Strahlung, entweder Röntgen- oder Teilchenstrahlung, benötigt, da der erreichte Zustand für optisches Licht undurchsichtig ist. Diese Strahlung muss intensiv genug sein, um idealerweise in einem einzigen Experiment genug Informationen zur möglichst vollständigen Charakterisierung des extremen Zustands zu erhalten.

ABB. 2 | EUROPEAN XFEL UND HED-HIBEF-INSTRUMENT



Die schematische Darstellung zeigt den Hochenergielaser DiPOLE 100-X und den Hochintensitätslaser ReLaX. Diese Systeme können kurzzeitig Hochenergiedichtezustände erzeugen, die mit dem Röntgenpuls des XFELs auf unterschiedliche Arten untersucht werden können. Auch hohe Magnetfelder können mit starken gepulsten Strömen in Spulen erzeugt werden. Statische Hochdruckexperimente werden mit Hilfe von Diamantstempelzellen durchgeführt (Bild: HZDR / U. Lehmann).

Einzigartige experimentelle Möglichkeiten

Die beste Möglichkeit zur experimentellen Charakterisierung der flüssigen Struktur von Kohlenstoff bietet die Beugung von Röntgenstrahlen oder Neutronen. Letztere erreichen bisher nicht die benötigten Teilchenzahlen in einem Puls. So waren es bis vor kurzem gepulste Röntgenquellen, die mit Hilfe von Hochenergielasern erzeugt wurden, die erste rudimentäre Einblicke in die flüssige Struktur von Kohlenstoff erreichen konnten. Dies erfolgte allerdings nur bei wenigen Messpunkten im reziproken Raum und mit großen Fehlerbalken, was eine erste grobe Selektion von Modellen erlaubte. Aber ein direkter Rückschluss auf die Paarverteilungsfunktion ist damit nicht möglich [9]. Die Paarverteilungsfunktion beschreibt hier die Häufigkeit, mit der man

ein Kohlenstoffatom in einem bestimmten Abstand vom zentralen Kohlenstoffatom findet.

Das Aufkommen von Röntgen-Freie-Elektronen-Lasern (X-ray Free Electron Lasers, XFELs) änderte dies grundlegend. Der European XFEL ist derzeit die leistungsfähigste Quelle für harte Röntgenstrahlung in Europa – und eine der wenigen weltweit, welche die Anforderungen für die Erforschung von Hochenergiedichtezuständen wie flüssigem Kohlenstoff erfüllt. Mit seinen ultrakurzen Pulsen im Femtosekundenbereich, seiner hohen Brillanz und einer Wiederholrate von zehn Pulsen pro Sekunde, die jeweils nochmal in bis zu 352 Einzelpulse aufgefächert werden können, setzt der European XFEL Maßstäbe für zeitaufgelöste Experimente unter extremen Bedingungen.

Im internationalen Vergleich steht der European XFEL auf Augenhöhe mit führenden Röntgen-Freie-Elektronen-Lasern wie dem japanischen SACLA (Spring-8 Angstrom Compact free electron Laser) oder der US-amerikanischen LCLS (Linac Coherent Light Source) am SLAC National Accelerator Laboratory in Kalifornien. In China wird mit SHINE (Shanghai High repetition rate XFEL and Extreme light facility) gerade eine große Anlage mit ähnlichen Zielsetzungen gebaut.

Doch insbesondere im Bereich der Hochenergiedichteforschung besitzt der European XFEL durch sein spezialisiertes HED-Instrument und die dedizierte Infrastruktur der Helmholtz International Beamline for Extreme Fields (HiBEF) eine weltweit einzigartige Kombination aus Röntgenquelle, Hochleistungslasern zur Erzeugung extremer Zustände wie flüssigem Kohlenstoff und Diagnostiktechnologie (Abbildung 2). Europa verfügt damit über eine Forschungseinrichtung, die nicht nur physikalische Extremzustände zugänglich macht, sondern auch die notwendigen Werkzeuge bereitstellt, um sie mit bislang unerreichter Genauigkeit zu vermessen [10].

Gegründet bereits im Jahr 2013, und damit sechs Jahre vor den ersten Experimenten am HED-Instrument

HOCHENERGIELASER DIPOLE 100-X

DiPOLE 100-X ist ein hochleistungsfähiges, diodengepumptes Festkörperlaser-System am HED-HiBEF-Instrument des European XFEL in Schenefeld. Es wurde von der Central Laser Facility des Rutherford Appleton Laboratory in Zusammenarbeit mit der Universität Oxford entwickelt und im Rahmen des UK-HiBEF-Konsortiums bereitgestellt.

Der Laser erreicht Pulsenergien von bis zu 100 Joule bei einer Wellenlänge von 1030 nm und arbeitet im Nanosekunden-Pulsregime. Mit einer für diese Energie einzigartigen Wiederholrate von bis zu 10 Hz liefert das System eine durchschnittliche optische Leistung im Kilowatt-Bereich. Die zeitliche Pulsform kann flexibel zwischen ungefähr 2 ns und 15 ns gestaltet werden, was eine präzise Anpassung an unterschiedliche Experimente erlaubt.

Technisch basiert das System auf einer diodengepumpten Yb:YAG-Verstärkerarchitektur mit kryogen gekühlten Multi-Slab-Verstärkern, die hohe Effizienz und Stabilität ermöglichen. Für die meisten Experimente wird der Laserstrahl frequenzverdoppelt, um grünes Licht bei 515 nm zu erzeugen.

Am European XFEL wird der Laser synchron mit den ultrakurzen Röntgenpulsen des Freie-Elektronen-Lasers betrieben. Dadurch können Materialien gleichzeitig mit intensiven Laser- und Röntgenimpulsen untersucht werden. Hauptanwendungsgebiet ist die Erzeugung von lasergetriebenen Schockwellen in Materialien, die extreme Druck- und Temperaturbedingungen erreichen und neue Einblicke in Materiezustände ermöglichen, wie sie etwa im Inneren von Planeten auftreten.

im Jahr 2019, ist HIBEF ein internationales Konsortium unter der Leitung des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf (HZDR) in enger Kooperation mit DESY. Heute vereint das Konsortium über 350 Forschende aus rund 60 Institutionen in 16 Ländern – neben HZDR und DESY haben auch der britische Science and Technology Facilities Council (STFC), das französische CNRS sowie auch US-amerikanische Institute wichtige Geräte wie Laser, Spektrometer, Hochgeschwindigkeitskameras und einzigartige fachliche Expertise beigebracht mit dem Ziel, Materie unter extremen physikalischen Bedingungen gemeinsam zu untersuchen.

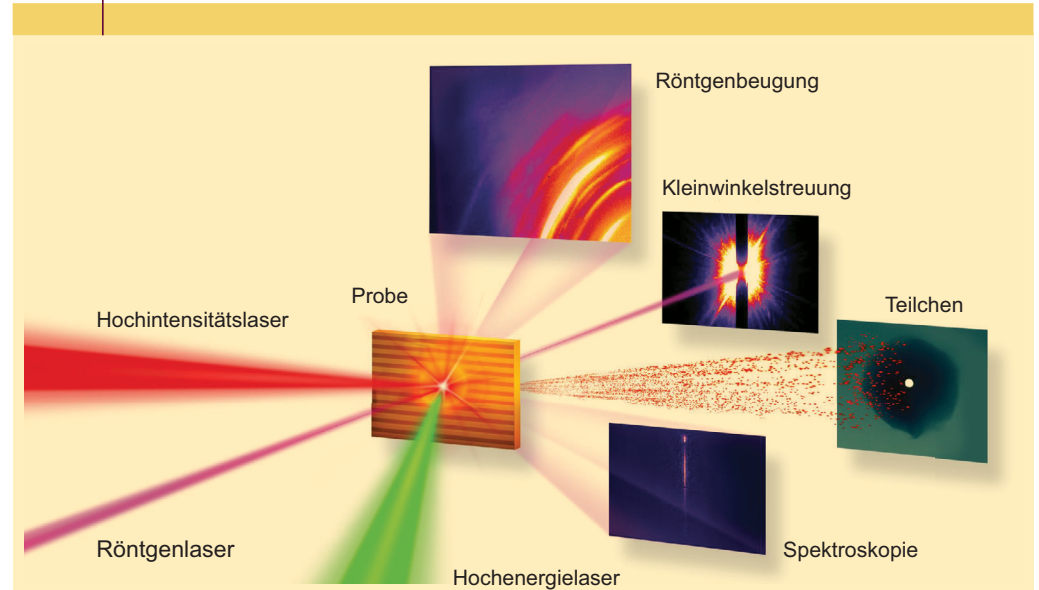
Die Investitionen in HIBEF – inklusive Planung, Bau und Betrieb für einen Zeitraum von zehn Jahren – belaufen sich auf rund 120 Millionen Euro. Die Finanzierung erfolgt gemeinschaftlich durch die Helmholtz-Gemeinschaft, der britische STFC und durch den European XFEL im Rahmen seiner Nutzerkonsortien-Initiative.

HIBEF bereichert die Ausrüstung des HED-Instruments um spezialisierte Geräte, Infrastrukturen und Experten in Technik und Wissenschaft. Zu den sogenannten „Treibern“ zählen unter anderem zwei leistungsstarke optische Lasersysteme, ReLaX und DiPOLE 100-X. Letzteres ist ein bedeutender Beitrag Großbritanniens zum European XFEL und erlaubt Pulsenergien im Bereich von 100 Joule bei wenigen Hertz Repetitionsrate, bei außergewöhnlich hoher Zuverlässigkeit (siehe auch „Hochenergielaser DiPOLE 100-X“). Die Kombination eines solchen Lasersystems mit den ultrakurzen, brillanten Röntgenpulsen des XFEL eröffnet so neue Wege, Materie unter Extrembedingungen mit bislang unerreichter Präzision zu untersuchen – so auch die flüssige Struktur von Kohlenstoff.

Die Forschungskampagne

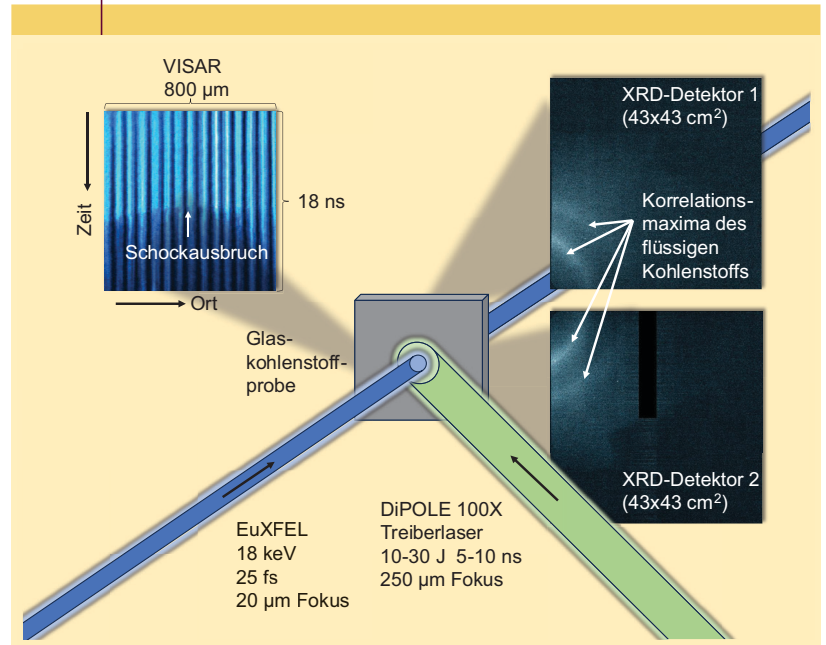
Das erste Experiment mit dieser einzigartigen Infrastruktur fand im Mai 2023 als großes Ereignis für die Forschungscommunity statt [11]. Mehr als 100 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus der ganzen Welt waren in die zweiwöchige Experimentenkampagne involviert, und die Anlagen funktionierten bei diesem ersten Versuch bereits ausgesprochen gut. Das Ziel der Kampagne war die Demonstration der Kombination von DiPOLE 100-X und European XFEL für mehrere einfache Beispielmaterien – darunter auch Kohlenstoff [12].

ABB. 3 | DIAGNOSTIKKONFIGURATION AM HED-HIBEF-INSTRUMENT



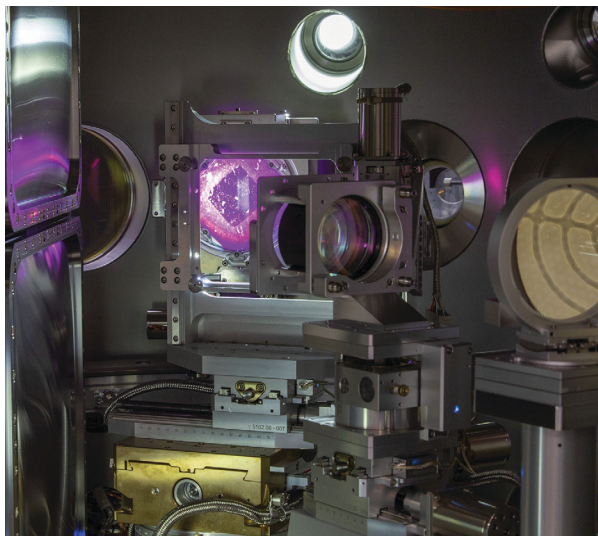
Die XFEL-Strahlung kann die mit den Lasern bestrahlten Proben durchdringen und über Beugung Strukturen im Ångström-Bereich auflösen. Kleinwinkelstreuung erlaubt die Bildgebung von nanometergroßen Strukturen. Spektral aufgelöste Röntgenstreuung gibt unter anderem Einblicke in die elektronische Struktur. Neben der reinen Röntgendiagnostik stehen weitere Methoden zur Verfügung: zum Beispiel Teilchendetektoren oder optische Diagnostiken (Bild: HZDR / U. Lehmann).

ABB. 4 | SCHEMA DES AUFBAUS



Der Treiberlaser DiPOLE 100-X erzeugt über Schockkompression für einige Nanosekunden die zur Kohlenstoffverflüssigung notwendigen Bedingungen. Ein Velocity Interferometer System for Any Reflector (VISAR, links oben) misst die Dynamik der Kompressionswellen, während die mikroskopische Struktur der Probe durch Beugung der vom European XFEL kommenden Röntgenpulse (von links unten) auf großflächigen Detektoren (XRD-Detektoren, rechts) bestimmt wird (Bild: aus [12]).

Als Ausgangsmaterial für dieses spezielle Experiment wurde Glaskohlenstoff (Glassy Carbon) gewählt. Die



Blick in das Innere der Interaktionskammer IC2 am HED-HIBEF-Instrument. Durch den leeren Probenhalter in der Mitte kann man die pink erscheinenden Laserspiegel sehen. Die Linsenhalterung rechts im Vordergrund gehört zum VISAR-System, das den Druck in der Probe misst. Links am Rand sieht man gut die zwei großen Paneele des des Röntgendetektors, der das Beugungsbild auffängt. Die empfindlichen Detektoroberflächen sind mit dünner Aluminiumfolie bespannt (Bild: European XFEL).

Bestrahlung mit dem Hochenergielaser erzeugt eine Kompressionswelle, die in wenigen Nanosekunden durch das etwa 100 μm dicke Material läuft (Abbildung 3). Dabei entsteht ein enormer Druck, der das Material auf mehr als das Doppelte seiner Ausgangsdichte komprimiert und gleichzeitig aufheizt. In der Spitze wurden bei dem Experiment Drücke um 1,5 Millionen bar (150 GPa) und Temperaturen von mehr als 7000 K in der Probe erreicht – ausreichend für die Erzeugung von flüssigem Kohlenstoff. Durch Variieren der Laserintensität können unterschiedliche Druck- und Temperaturbereiche entlang einer Linie im Phasenraum – der Schock-Hugoniot-Kurve – abgetastet werden. Diese stellt für einen gegebenen Ausgangszustand alle durch Schockkompression erreichbaren Endzustände dar.

Die extremen Materialzustände werden mit Hilfe von Beugung der XFEL-Pulse an den Strukturen im Inneren des Probenvolumens vermessen. Die Röntgenpulse sind mit etwa 25 fs wesentlich kürzer als die Zeitskala der Kompressionswellen von wenigen Nanosekunden. So können präzise Momentaufnahmen der Zustände im Inneren der Probe gewonnen werden. Durch Optimieren der zeitlichen Abfolge des Lasers, der die Kompressionswelle erzeugt, und dem Röntgenpuls des European XFEL kann exakt der Moment abgepasst werden, bei dem die Kompressionswelle das Ende der Probe erreicht hat und somit möglichst homogene Bedingungen im Probenvolumen bestehen.

Im Experiment zeigte sich, dass bei niedrigeren Druck- und Temperaturbedingungen – etwa 0,8 Millionen bar (80 GPa) und 5000 K – zunächst Diamant aus dem

Glaskohlenstoff entsteht (Abbildung 4). Eine leichte Erhöhung der Laserintensität erlaubt in der Folge – bei etwa 1,1 Millionen bar (110 GPa) und 6500 K – den Übergang zur Flüssigkeit. Hier wird zunächst der Koexistenzbereich beobachtet, in dem sowohl die Flüssigkeit als auch der Festkörper (Diamant) bestehen können – ähnlich wie bei flüssigem Wasser und Eis bei 0 °C unter Normaldruck. Bei den höchsten erreichten Laserintensitäten liegt bei Drücken um 1,5 Millionen bar und Temperaturen über 7000 K die reine Flüssigkeit vor.

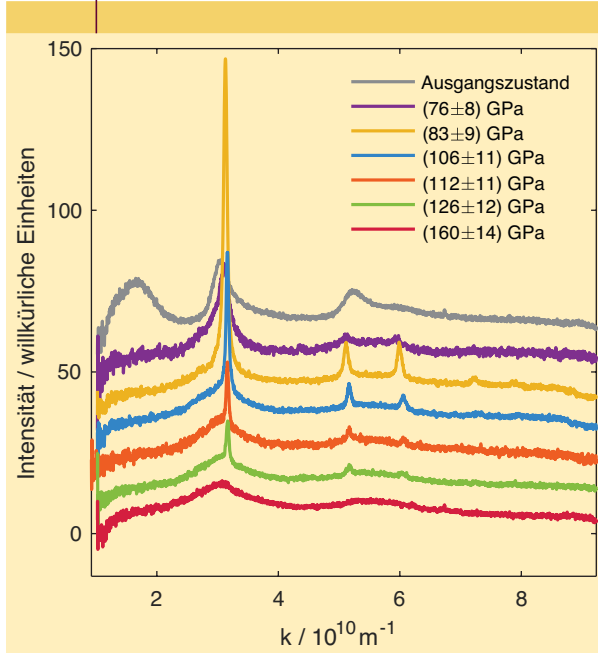
Die hohe Präzision der Daten erlaubt über den Vergleich mit Simulationen von flüssigem Kohlenstoff die Bestimmung von Dichte und Temperatur (Abbildungen 5 und 6). Die genauesten Ergebnisse werden dabei mit Hilfe von Dichtefunktionaltheorie und Molekulardynamik-Simulationen (DFT-MD) erreicht. Im Koexistenzbereich von Diamant und Flüssigkeit kann über die Beugung an den Diamantkristallebenen auch die Gitterkonstante und somit die Dichte des Festkörpers bestimmt werden. Es zeigt sich, dass bei den untersuchten Bedingungen die Flüssigkeit eine um etwa 5 % geringere Dichte als der Festkörper aufweist. Zusammen mit der beobachteten Steigung der Schmelzkurve kann man unter Verwendung der Clausius-Clapeyron-Gleichung auch die Schmelzenthalpie abschätzen.

Die erhaltene Strukturmessung von flüssigem Kohlenstoff ist von bisher unerreichter Qualität und erlaubt erstmals über Fourier-Transformation die experimentelle Bestimmung der Paarverteilungsfunktion – also die Wahrscheinlichkeit, in einer bestimmten Distanz von einem zentralen Kohlenstoffatom ein weiteres zu finden (Abbildung 7 oben). Es zeigt sich eine Flüssigkeit mit durchschnittlich vier nächsten Nachbarn eines zentralen Kohlenstoffatoms – eine komplexe tetraedrische Struktur ähnlich wie bei Wasser und keine ikosaedrische Struktur, wie sie für „einfachere“ Flüssigkeiten, etwa beim bekannten Lennard-Jones-Modell, charakteristisch ist.

Weiterhin erlaubt die Eingrenzung der Schmelztemperatur den Test von Modellen und Zustandsgleichungen des Fest-Flüssig-Phasenübergangs von Kohlenstoff (Abbildung 7 unten). Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit neueren DFT-MD-Zustandsgleichungsrechnungen, während andere ältere Simulationen dieser Methodik höhere Temperaturen für das Schmelzen vorhersagen, was mit dem Experiment nicht vereinbar ist. Mehrere Schmelzkurven, die auf stärker vereinfachten Modellen basieren, können durch die Messung ausgeschlossen werden. Darüber hinaus zeigt Abbildung 7 rechts die vorhergesagten Koordinationszahlen aktueller DFT-MD-Simulationen. Auch hier findet sich eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment.

Mit diesen Ergebnissen ist es nun klar, dass einfache Modelle den flüssigen Zustand von Kohlenstoff nicht gut abbilden und dass anspruchsvolle atomistische Simulationen erforderlich sind, um Prozesse vorherzusagen,

ABB. 5 | ERGEBNISSE DER RÖNTGENBEUGUNG

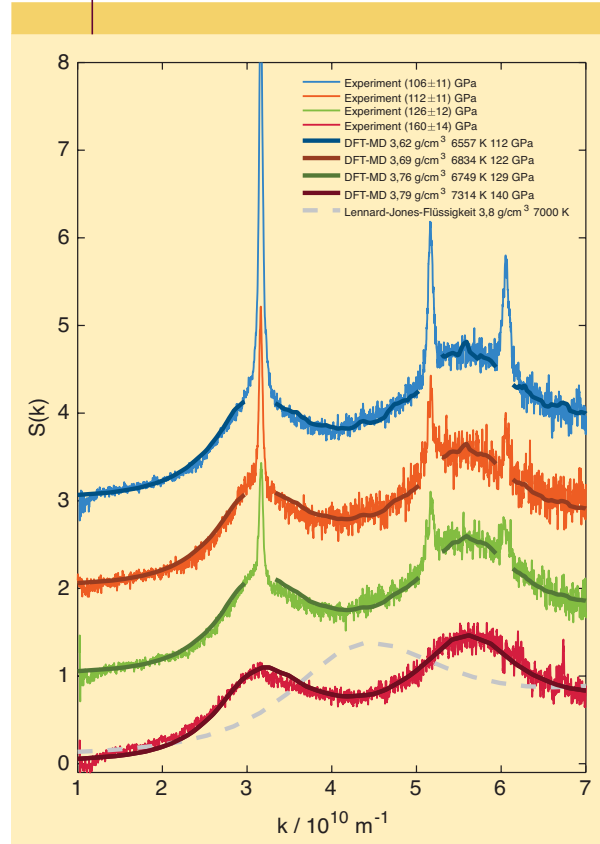


Der amorphe Ausgangszustand zeigt breite Beugungsstrukturen. Ab 76 GPa (0,76 Mbar) zeigen sich scharfe Beugungsmaxima, die mit der Diamantstruktur übereinstimmen. Bei 106 GPa treten zusätzlich wieder breite Strukturen auf, da der Koexistenzbereich zwischen Flüssigkeit und Festkörper erreicht wurde. Ab 160 GPa wurde die pure Flüssigkeit beobachtet (Bild: aus [12]).

die flüssigen Kohlenstoff betreffen. Diese Erkenntnis wird dazu beitragen, die Rolle von Kohlenstoff für die innere Struktur und Entwicklung von Eisriesen wie Uranus und Neptun sowie vergleichbaren kohlenstoffreichen Exoplaneten zu klären. Darüber hinaus werden unsere Ergebnisse die Wahl geeigneter Ablatormaterialien für die Trägheitsfusion und damit einer potentiell sauberen und zuverlässigen Energieerzeugung sowie die Synthese neuer Kohlenstoffmaterialien – wie der lange gesuchten, bislang jedoch nur theoretisch vorhergesagten BC-8-Struktur – unterstützen.

Obwohl es gelang, die Struktur von flüssigem Kohlenstoff zu bestimmen und die Schmelztemperatur von Kohlenstoff einzugrenzen, waren die Experimente noch nicht in der Lage, die elektronischen Eigenschaften von flüssigem Kohlenstoff zu messen. Unter den untersuchten Bedingungen wird vorhergesagt, dass flüssiger Kohlenstoff metallisch ist – im Gegensatz zur isolierenden Diamantstruktur des Elements. Tatsächlich könnte metallischer flüssiger Kohlenstoff einen wesentlichen Beitrag zu den Magnetfeldern kohlenstoffreicher Planeten leisten, welche die erforderlichen Bedingungen bieten und erhebliche Mengen an Kohlenstoff enthalten. Dies ist ähnlich wie bei Wasserstoff, der unter hohem Druck metallisch wird und in sehr wasserstoffreichen Planeten wie Jupiter für ein starkes Magnetfeld sorgt.

ABB. 6 | DETAILIERTE ANALYSE DER RÖNTGENBEUGUNG



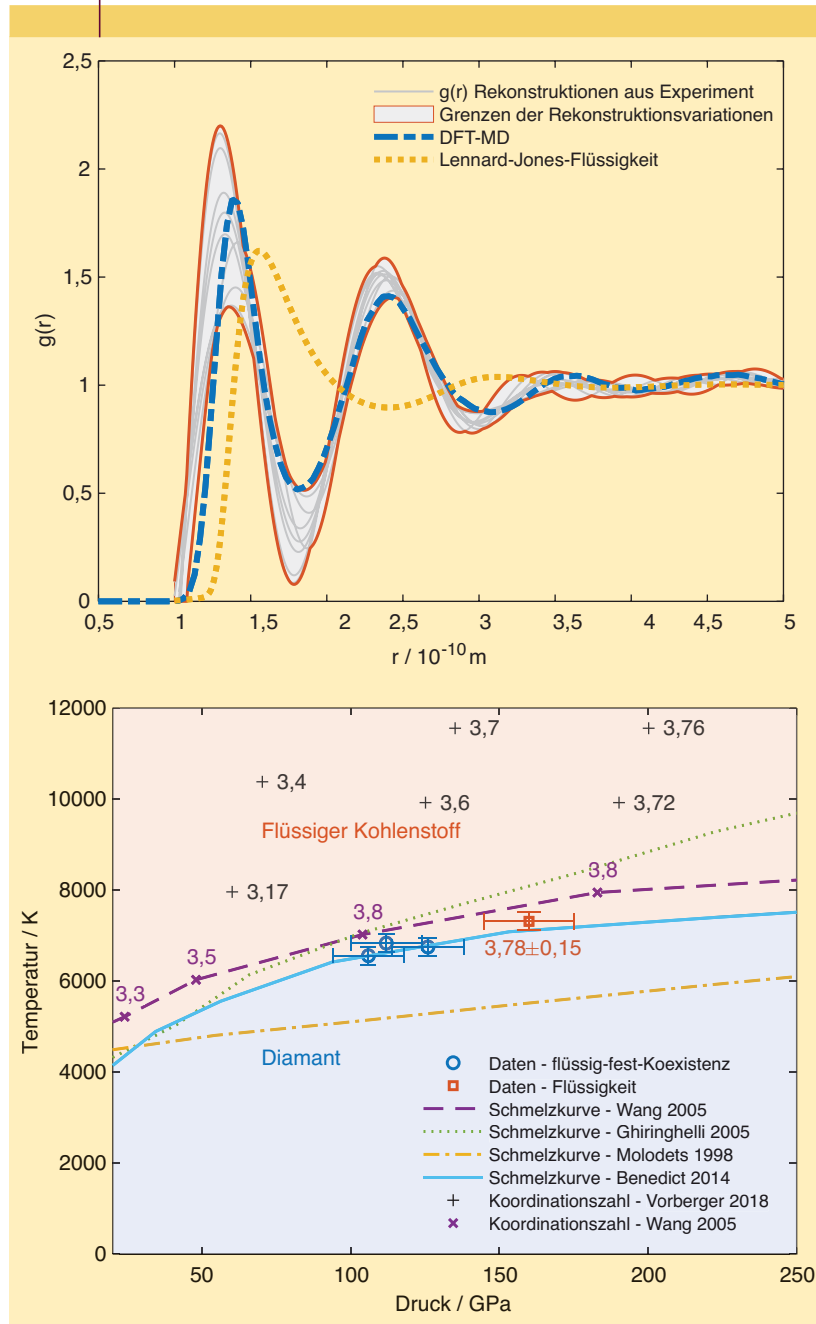
Die Anpassung von Struktursimulationen mit Hilfe von Dichtefunktionaltheorie und Molekularodynamik (DFT-MD) erlaubt die Bestimmung von Temperatur und Dichte der Flüssigkeit $S(k)$: Strukturfaktor. Es wird auch deutlich, dass die flüssige Struktur des Kohlenstoffs sich nicht mit einfachen Modellen, wie Lennard-Jones, beschreiben lässt (Bild: aus [12]).

Tiefere Einblicke dank höherer Repetitionsraten

Während die hier vorgestellten Experimente zu flüssigem Kohlenstoff noch auf wenigen Einzelschüssen des DiPOLE-100-X-Systems beruhen, werden zukünftige Experimente die revolutionäre Wiederholrate des DiPOLE-100-X-Lasersystems noch besser ausnutzen. Diese Möglichkeit wird die Methodik vieler Experimente grundlegend verändern: Sie erlaubt es, Zustände der Materie mit hoher Wiederholgenauigkeit zu erzeugen, zahlreiche Einzelmessungen durchzuführen und so Datensätze mit exzellenter Statistik und geringen Unsicherheiten zu gewinnen.

Ein wesentlicher Vorteil liegt darin, dass sich nicht mehr nur einzelne, speziell ausgewählte Punkte im Phasendiagramm untersuchen lassen, etwa bei ganz bestimmten Kombinationen von Temperatur, Druck und Dichte. Vielmehr wird es möglich sein, ganze Parameterbereiche systematisch abzutasten – etwa durch Variation der Pumpenergie, der äußeren Felder oder des Targets. Dies eröffnet neue Perspektiven für die umfassende Kartierung von Übergangspänomenen oder Phasenwechseln unter Extrembedingungen.

ABB. 7 PAARVERTEILUNGSFUNKTION UND PHASENDIAGRAMM



Oben: Die Paarverteilungsfunktion $g(r)$, die über Fourier-Transformation aus dem gemessenen Strukturfaktor $S(k)$ gewonnen werden kann. Auch hier zeigt sich die gute Übereinstimmung mit Dichtefunktionaltheorie und Molekulardynamik (DFT-MD) und die unzureichende Beschreibung durch einfachere Modelle wie Lennard-Jones. **Unten:** Experimentell charakterisierter Ausschnitt des Phasendiagramms von Kohlenstoff (Bild: aus [12]). Die Messungen ermöglichen am European XFEL den Ausschluss bestimmter Modelle des Fest-Flüssig-Phasenübergangs und zeigen eine gute Übereinstimmung mit DFT-MD-Vorhersagen einer tetraedrischen Flüssigkeit mit im Mittel etwa vier nächsten Nachbarn eines zentralen Kohlenstoffatoms.

Die hohe Repetitionsrate wird es auch ermöglichen, spektroskopische Methoden einzusetzen, um elektronische Eigenschaften zu erfassen, etwa um die Leitfähigkeit solcher Flüssigkeiten unter extremen Druck- und

Temperaturbedingungen zu charakterisieren. Darüber hinaus soll die gezeigte Methodik auf verschiedene andere Materialien ausgeweitet werden, um die Flüssigkeitsstruktur unter extremen Druck- und Temperaturbedingungen zu untersuchen. Insbesondere sollen Mischungen leichter Elemente erforscht werden, die in Planetenkernen existieren könnten, sowie die daraus resultierende Chemie unter extremen Bedingungen. Dies könnte auch für die effiziente Synthese dotierter Nanodiamanten oder anderer Phasen mit potentiellen technologischen Anwendungen interessant sein [13].

Gleichzeitig bringt die hohe Repetitionsrate aber auch neue Herausforderungen mit sich. Die präzise Justage der optischen und diagnostischen Komponenten muss für viele Wiederholungen dauerhaft stabil bleiben. Zudem entsteht ein enormer Datenstrom, der eine automatisierte Datenerfassung und Auswertung erforderlich macht. Auch die Interaktion zwischen Nutzern und Experiment verändert sich: Es braucht schnelle Rückkopplungssysteme, mit denen Forschende den Verlauf und Erfolg ihrer Messreihen bereits während des Experiments bewerten und gegebenenfalls anpassen können.

Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, wird bei HED-HIBEF zunehmend ein Konzept von standardisierten Aufbaukonfigurationen verfolgt. Diese vorab definierten Experimentalplattformen sind bezüglich des Aufbaus, der Sensorik und der Datenerfassung gut charakterisiert. Dies ermöglicht kurze Rüstzeiten, verlässliche Betriebsweisen und eine hohe Vergleichbarkeit der Messergebnisse. Gleichzeitig bedeutet es allerdings auch gewisse Einschränkungen für unkonventionelle oder neuartige Experimente, die spezifische Konfigurationen erfordern könnten. Doch der Zugewinn an Effizienz, Datengüte und Betriebssicherheit macht diesen Ansatz – insbesondere für hochfrequente Lasersysteme – zu einem vielversprechenden Weg in der Nutzerforschung der nächsten Generation.

Über flüssigen Kohlenstoff hinaus reichen die wissenschaftlichen Fragestellungen, die mit HED-HIBEF verfolgt werden, von der Untersuchung hochdichter Plasmen über Strukturveränderungen in kondensierter Materie bis hin zur Erforschung von Zuständen, wie sie im Inneren großer Planeten oder in Trägheitsfusionsexperimenten vorkommen. Insbesondere der kombinierte Einsatz von Lasern, Magnetfeldern und hochbrillanten Röntgenstrahlen erlaubt es, Materie in bislang unzugängliche Phasenräume zu bringen und ihre Reaktionen mit extrem hoher zeitlicher und räumlicher Auflösung zu beobachten.

Auch in der Grundlagenforschung zu Quantenmaterialien und Hochtemperatursupraleitung ergeben sich durch die Möglichkeit, extreme äußere Bedingungen zu realisieren, neue Perspektiven. Die Plattform ermöglicht es, Phasenübergänge oder elektronische Neuordnungen in Echtzeit zu verfolgen – etwa durch

INTERNET

Video zum Experiment
<https://t1p.de/LiqCarb>

Video zu HIBEF (englisch)
<https://t1p.de/HIBEFeng>

Video zu HIBEF (deutsch)
<https://t1p.de/HIBEFde>

gezielte Anregung mit einem Laser und anschließender Beobachtung der Struktur mit Röntgenstreuung oder -absorption.

Mit HED-HIBEF wurde am European XFEL eine weltweit einzigartige Plattform geschaffen, die den interdisziplinären Zugang zu einer der faszinierendsten Forschungsfronten der modernen Physik ermöglicht: der kontrollierten Erzeugung und Untersuchung von Materie unter Extrembedingungen. Das Zusammenspiel von Hochleistungslasern, starken Magnetfeldern, Diamant-Stempel-Zellen und hochbrillanten Röntgenpulsen macht HED-HIBEF zu einem echten Leuchtturmprojekt europäischer Forschungs Kooperation – mit einem enormen wissenschaftlichen Potential für die kommenden Jahre.

Zusammenfassung

Kohlenstoff ist ein zentrales Element für Leben, Technik und Planetenphysik, doch seine flüssige Form ist unter Normalbedingungen kaum zugänglich, da sie extrem hohe Drücke und Temperaturen erfordert. Im Inneren großer Planeten wie Uranus, Neptun oder Jupiter kann flüssiger, vermutlich metallischer Kohlenstoff existieren und möglicherweise zur Entstehung planetarer Magnetfelder beitragen. Auch für technische Anwendungen wie neue Kohlenstoffmaterialien und die Trägheitsfusion ist das Verständnis seines Fest-Flüssig-Übergangs von großer Bedeutung. Mit dem European XFEL und der HED-HIBEF-Infrastruktur gelang es nun, flüssigen Kohlenstoff im Labor für kurze Zeit zu erzeugen und seine Struktur mit hoher Präzision zu vermessen. Die Experimente zeigen, dass flüssiger Kohlenstoff eine komplexe, tetraedrische Struktur ähnlich der von Wasser besitzt. Diese Ergebnisse liefern wichtige Grundlagen für realistischere Modelle, zukünftige Experimente und Anwendungen in Astrophysik, Materialforschung und Energietechnik.

Stichwörter

Extreme Bedingungen, flüssiger Kohlenstoff, hoher Druck, European XFEL.

Danksagung

Open-Access-Veröffentlichung ermöglicht und organisiert durch Projekt DEAL.

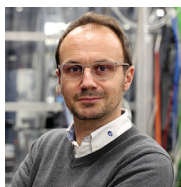
Literatur

- [1] C. J. Hull et al., Chem. Phys. Lett. **2020**, 749, 137341.
- [2] F. P. Bundy et al., Carbon **1996**, 34, 141.
- [3] G. Zhao et al., Physica Scripta **2013**, 88, 045601.
- [4] J. Vorberger et al., arXiv:2505.02494 (2025).
- [5] D. Kraus, T. R. Preston, U. Zastrau, Nature Rev. Phys. **2026**, 8, 27.
- [6] J. Shi et al., Phys. Rev. Lett. **2023**, 131, 146101.
- [7] K. Nguyen-Cong et al., J. Phys. Chem. Lett. **2024**, 15, 1152.
- [8] H. Abu-Shawareb et al., Phys. Rev. Lett. **2024**, 132, 065102.
- [9] D. Kraus et al., Phys. Rev. Lett. **2013**, 111, 255501.
- [10] U. Zastrau et al., J. Synchrotron Radiat. **2021**, 28, 1393.
- [11] M. G. Gorman et al., J. Appl. Phys. **2024**, 135, 165902.
- [12] D. Kraus et al., Nature **2025**, 642, 351.
- [13] Z. He et al., Science Advances **2022**, 8, eabo0617.

Die Autoren



Dominik Kraus ist Professor für Hochenergiedichtephysik an der Universität Rostock und Gruppenleiter am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR). Promotion 2012 an der TU Darmstadt, danach Postdoc an der UC Berkeley und am Lawrence Livermore National Laboratory, USA. Ab 2016 Helmholtz-Nachwuchsgruppenleiter und ab 2018 auch Abteilungsleiter am HZDR. Berufung an die Universität Rostock im Jahr 2020. Seine Forschungsschwerpunkte sind Phasenübergänge und Chemie in Riesenplaneten, warme und heiße dichte Materie sowie Materialsynthese unter extremen Bedingungen (Bild: Marco Kirsch).



Ulf Zastrau ist leitender Wissenschaftler am European X-Ray Free-Electron Laser (European XFEL) in Schenefeld/Hamburg und Gruppenleiter für High Energy Density (HED) Science. Promotion 2010 an der Friedrich-Schiller-Universität Jena, danach Postdoc an der Linac Coherent Light Source (LCLS), USA. 2015 Habilitation in Jena und Wechsel zum European XFEL. Er ist Experte für die Erzeugung und Diagnose dichter Plasmen mithilfe ultraschneller Röntgen- und Lasertechniken und koordiniert die Entwicklung und Anwendung innovativer Experimentiermethoden (Bild: EuXFEL).

Anschrift

Prof. Dr. Dominik Kraus, Universität Rostock, Institut für Physik, Albert-Einstein-Str. 23, 18059 Rostock.
dominik.kraus@uni-rostock.de

Dr. Ulf Zastrau, European XFEL GmbH, Holzkoppel 4, 22869 Schenefeld.
ulf.zastrau@xfel.eu