

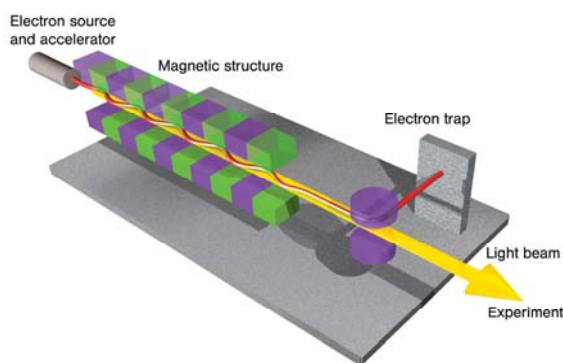
**ΔΙΚΤΥΟ ΓΙΑ ΤΗΝ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΑΞΙΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΟΥ
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟΥ X-FEL ΑΠΟ ΤΗΝ ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΗ
ΚΟΙΝΟΤΗΤΑ**

**NETWORK TO OPTIMIZE USE OF THE EUROPEAN X-FEL BY THE
GREEK RESEARCH COMMUNITY**

FEASIBILITY STUDY ΜΕΛΕΤΗ ΣΚΟΠΙΜΟΤΗΤΑΣ

**REGARDING THE PARTICIPATION OF GREECE IN THE
ΓΙΑ ΤΗΝ ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΑΣ ΣΤΟ**

European X-ray Free Electron Laser (European X-FEL)



Project acronym: BE/OPT-XFEL

Date of preparation of the feasibility study: April 20th, 2010

The Feasibility study was prepared by **Prof. Michael KOKKINIDIS**, IMBB/FORTH

in collaboration with :

University of Crete	Prof. A. Mitraki
National Hellenic Research Foundation	Dr. G. D. Chryssikos & Dr. E. Chrysina
NCSR “DEMOKRITOS”	Dr. M. Vlassi
Agricultural University of Athens	Prof. A. Hountas & Prof. E. Eliopoulos
Democritus University of Thrace	Prof. N.M. Glykos
University of Patras	Prof. B. Nastopoulos
Technical University of Crete	Prof. S.D. Moustazis

and with input from **Prof. Janos Hajdu**, Laboratory of Molecular Biophysics, Uppsala University, Sweden.

The European X-ray Free Electron Laser (European X-FEL) which is being built in Hamburg, Germany, will be a world leading facility for the production of ultrashort X-ray flashes - 30 000 times per second and with a brilliance that is a billion times higher than that of the best conventional X-ray radiation sources. With its worldwide unique characteristics, the facility will open up completely new research opportunities for scientists and industrial users.

The European X-FEL will provide several light sources for X-ray flashes with different characteristics. Some of them will generate X-ray radiation with the properties of laser light. To produce X-ray flashes, bunches of electrons are first accelerated to high energies and then directed through special arrangements of magnets. In the process, the particles emit light that amplifies itself until an extremely short and intense X-ray flash is produced. Experiments with the X-ray flashes of the European X-FEL are similar in their basic setup: Depending on the experimental requirements, the X-ray flashes can be widened, focused, filtered or weakened using optical elements such as mirrors, gratings, slits or crystals. The samples are provided in the experiment station, where they interact with the X-ray flashes. The results of these interactions are measured using special detectors. The data is recorded and processed for analysis. The researchers can follow the progress of the experiments from a neighbouring control room.

Research at the European X-FEL covers a broad range of natural sciences. These include materials physics, nanoscience, chemistry and structural biology. Potential technological applications emerging from these fields range from the development of novel nanomaterials to a better understanding of pathogenicity mechanisms, leading to cure of diseases.

It is anticipated that the availability of X-ray pulses with peak brilliance of up to nine orders of magnitude greater than existing 3rd generation light sources shall allow for the performance of experiments in a wide range of disciplines. These include for example, the follow-up of structural modifications at the atomic level on the sub-ps timescale during chemical reactions and phase transformations, the determination of macromolecular structures without the need for crystallization etc. These are areas have been found in the course of the preparation of this feasibility study to be of critical importance for the Greek scientific community; optimum exploitation of the unique opportunities generated by X-FEL however requires a systematic preparation with follow-up measures (after termination of the BE/OPT-XFEL project) until the facility becomes fully operational.

The Greek BE/OPT-XFEL network

The BE/OPT-XFEL network has been established with the aim to facilitate an optimum use of the European X-FEL by Greek scientists and companies. The network has now identified the majority of potential X-FEL users in Greece and has established a forum for discussions on the X-FEL technology platform nationally and internationally. The specific aims of the network are: **a)** To provide information on all technical, legal and financial aspects which are necessary for the optimum use of the European X-FEL by the Greek research community through workshops, Users'

meetings and a regularly updated internet site **b)** To prepare the X-FEL feasibility study. **c)** To catalyse and encourage as far as possible, research and development projects in areas for which X-FEL techniques will become relevant. **d)** To mobilize the potential users community in Greece, (comprising experts in diverse fields from structural biology to synchrotron light sources and ultrafast lasers). **e)** to promote research and attract National and European/International funding to X-FEL-related activities by Greek groups.

BASIC PARAMETERS OF THE GREEK COMMUNITY OF EUROPEAN X-FEL USERS

Due to the deadline for the delivery of this report, the results are based on the first round of questionnaire distribution, prior to any dissemination event (e.g. workshop). Despite this limitation, we feel that the qualitative aspects of the expressed interest are accurate, and the total number of interested groups/researchers can only increase in the future.

In all, 68 Greek research groups or individual researchers (from 13 Universities and Research Centres) and one company interested to use X-FEL as a research tool have been identified via a specifically designed questionnaire which has been distributed among Greek scientists (Appendix C). This community of potential X-FEL users is scattered throughout the country:

1. Foundation for Research and Technology Hellas (9 groups/scientists from 3 Institutes/ Heraklion and Patras)
2. University of Crete (1 group/scientist/Heraklion)
3. Technical University of Crete(1 group/Chania)
4. University of Ioannina (2 groups/Ioannina)
5. University of Thessaly (2 groups/scientists/Larissa and Karditsa)
6. University of Thrace (1 group/Alexandroupolis)
7. University of Athens (8 groups/scientists from 3 Departments/Athens)
8. Agricultural University of Athens (4 groups/scientists from 2 Departments/Athens)
9. University of Patras (7 groups/scientists from 2 Departments/ Patras)
10. NCSR “DEMOKRITOS” (12 groups/scientists from 5 Institutes/Athens)
11. National Hellenic Research Foundation (19 scientists from 3 Institutes/Athens)
12. Hellenic Pasteur Institute (1 group/Athens)
13. TEI Patras (1 group/Patras)
14. Prisma Electronics SA, Alexandroupolis

The scientific expertise of these groups is highly relevant to X-FEL and includes biology (structural biology, protein engineering, biomedical applications etc), materials science (graphene, carbon nanotubes, polymers, glasses etc), nanotechnology (nanomaterials, biomimetic materials etc), biochemistry-enzymology, chemistry (*in silico* and *in vitro* chemistry, pharmaceutical chemistry, bioactive molecules), and physics (atomic physics, fast atomic processes, surface physics etc). A complete presentation of the expertise of these groups can be obtained from Appendix C. About 40% of the researchers/groups identify themselves by more than

one field. Interest in XFEL is equally distributed among Biology (22%), Physics (19%), Chemistry (31%) and Materials (26%).

Information about the research infrastructures used by these groups (available locally or accessible internationally) has been collected (Annex C) and analysed in terms of “X-FEL- complementarity”, i.e. the extent to which the X-FEL technology platform can complement these infrastructures, by enabling innovative experimental approaches that cannot be performed by conventional techniques. The locally available instrumentation reported by most groups provides a sufficient basis for the initiation/development of research projects that may lead to experiments at the European X-FEL. In addition, many groups already use European research infrastructures, e.g. synchrotrons (BESSY II, DESY, ESRF etc), the European Laserlab cluster, etc that are complementary to X-FEL. Their research is overwhelmingly funded by national and EU programmes, and occasionally by companies. The interests of these groups in terms of future experiments as well as their emerging research needs that can be addressed by the European X-FEL have been identified and are included in detail in the attached questionnaires (Annex C). When asked to estimate on a scale 0-10 the benefits of the X-FEL technology to the international competitiveness of their research (0=none,10=very much), the average response was 7.9. Those scientists involved in University teaching, expect overwhelmingly that the European X-FEL project will have a positive impact in their teaching activities. In most cases, the researchers favour the involvement of Greek companies in the European X-FEL project, although some regard this at the present stage as premature.

STATE OF THE ART

The XFEL technology will enable a multitude of completely different experiments – ranging from analyses of the structure of biomolecules to films of chemical reactions or investigations into extreme states of matter. These new research opportunities overlap strongly with the research interests and needs of the Greek users, as they were identified with the attached questionnaires (Appendix C). Areas of interdisciplinary research where Greek groups can strongly benefit from the European X-FEL include:

- *Deciphering the structure of biomolecules*

Using the X-ray flashes of the European XFEL, scientists can decipher the 3D structure of biomolecules, cell constituents and whole viruses. This will provide the basis for the medicines of the future.

- *Exploring the nanoworld in 3D*

The X-ray flashes of the European XFEL will enable completely novel, three-dimensional insights into the nanoworld and thus shed light on future technological applications.

- *Filming chemical reactions*

With the X-ray flashes of the European XFEL, scientists can film how molecules form and separate again or how they fulfil important functions in biological cells. This may contribute to improvements in energy generation or the production of chemical substances and lead to progress in medicine.

- *Unravelling magnetization*

The X-ray flashes of the European XFEL will enable scientists to study exciting aspects of magnetization – with direct applications in data storage.

- *Observing small objects in strong fields*

The European XFEL will create unique conditions for the investigation of atoms, molecules, atomic clusters or nanoparticles in extremely high X-ray radiation fields. These insights can lead not only to progress in basic research, but also to new products – such as novel catalysts or electronic devices controlled by X-ray radiation.

- *Investigating extreme states of matter*

The focused X-ray flashes of the European XFEL can create states of matter under extremely high pressures and temperatures. This will help to both develop new astrophysical models for planets and push ahead with fusion research for future energy generation here on Earth.

Details on the state-of-the art in **ultra-fast diffractive imaging with X-ray lasers** and selected RTD applications internationally that are highly relevant to the Greek scientific community are given in Appendix B.

COSTS & BENEFITS

Pending approval by the Greek Parliament, the European XFEL GmbH shareholder agreement (<http://www.xfel.eu/news/2009/20091130/>) foresees a **Greek contribution of 4.000.000 € to the construction costs of the European X-FEL**. The probable costs associated with the **use of the European X-FEL** have been estimated by the individual groups which completed the questionnaires of the BE/OPT-XFEL network. Despite strong variations among different disciplines it is estimated that on average the use of the European X-FEL will create additional costs in the research budgets of the individual groups in the order of **5800 € for travel and accommodation** and **5500 € for consumables** for each year in which the facility is used by the group. In addition **900.000 €** will be needed for instrumentation, this being a **non-recurrent investment**. Thus, **starting in 2014** and with the rather generous assumption of 15 different Greek groups using the European X-FEL annually, an **upper limit of 170.000 € additional travel and consumable costs per year is estimated for the X-FEL-related research by the Greek scientific community**. It can be confidently predicted that a large part of these additional costs plus the non-recurrent instrumentation costs will be covered through EU or international competitive grants, as the participation of Greek groups in the European X-FEL will considerably strengthen their international competitiveness to attract research funding.

At this stage, the **expected benefits** resulting from a Greek participation in the European X-FEL (selected benefits that strongly overlap with the priorities of the potential X-FEL users are listed in **Appendix B**) **are mainly associated with scientific knowledge generation and, by implication, innovation**. By creating a basis for the performance of **presently impossible and potentially revolutionary experiments** through the X-FEL technology (Annex B), the Greek scientific community will be put at the **forefront of the advancement of research**, and will help Greece to strengthen its base of **knowledge and technological know-how**. The

European X-FEL will create a scientific environment which will attract top-level scientists from all over the world and bring very different scientific disciplines together. This environment will be very positive for Greek scientists performing research at the European X-FEL, as such an interplay stimulates a multitude of ideas leading to innovation and applications.

On a mid- to long term basis **Greek companies** are also expected to benefit from the opportunities offered by the European X-FEL. Already at the present stage, **one company from Alexandroupolis** (Πρίσμα Ηλεκτρονικά ABEE) has expressed a strong interest in participation at the European X-FEL project. Further companies (e.g. pharmaceutical, biotechnology, software development companies) have been identified which could also benefit for the European X-FEL (APIVITA, VIANEX, KORRES, GENEKOR, BIOVISTA, REGULON).

As the potential X-FEL users and companies are scattered throughout the country, the potential socio-economic impacts from knowledge generation and innovation will be beneficial both at national and regional level, and harmonize with the Convergence Objective (http://ec.europa.eu/regional_policy/atlas2007/fiche_index_en.htm) of the EU.

At the present stage, no adverse legal implications can be identified from the participation of Greece in the European XFEL GmbH shareholder agreement. As mentioned this agreement is subject to ratification by the Greek Parliament.

EVALUATION OF COSTS & BENEFITS

From the above analysis it becomes obvious that the Greek Government research budget will have a medium-sized additional burden of 4.0 M€ through the construction costs of the European X-FEL, 0.9 M€ non-recurrent costs for the necessary instrumentation of Greek users plus a recurrent cost (after 2014) of approx. 0.17 M€ annually for running research projects at the X-FEL facility. If invested, this money will considerably strengthen Greek science, as it will catalyse the potential for breakthrough science in the country with impacts not only in basic research but also in the development of new products/applications or the improvement of products developed by Greek research groups and companies. Promotion of scientific excellence and mobility of Greek researchers through X-FEL will be also a benefit. The scientific results will foster innovation and are expected to be of great economic and societal benefit for the country, the regions and the cities that host scientific groups involved in X-FEL studies. On a long-term basis, scientific achievements made possible by X-FEL will have a positive economic impact through strengthening of the regional knowledge economy. Greek companies and the private sector will be in the long term beneficiaries from the developments made possible through the X-FEL project. In fact, the Institute for Allocation and Competition at the University of Hamburg, has already found positive impacts from X-FEL (even at the very early stage of its establishment) to a wide range of European companies (<http://www.xfel.eu/en/economic-impact/>), and these could be also extended to Greek companies.

To develop the positive impact of X-FEL in Greece however, adequate preparation of the Greek scientific community and private sector will be essential, and this will remain the main goal of the BE/OPT-XFEL network, at least during the transition

period until the European X-FEL becomes operational. An important task of the network is to identify critical bottlenecks (e.g. lack of international exposure and information) that may have adverse effects on the optimum use of the X-FEL infrastructure by Greek scientists.

CONCLUSIONS

This report concludes that benefits from the Greek participation in the European X-FEL in terms of scientific knowledge generation, innovation and technological exploitation (which will lay the ground for new product and technology development by Greek research groups and companies) will strongly outweigh costs.

The prerequisite for the exploitation of the opportunities offered by X-FEL however, is the adequate preparation of the scientific community and companies for the optimum access and use of this large-scale research infrastructure, until it becomes operational. Optimum preparation for the European X-FEL at national level can be best achieved and properly coordinated through the BE/OPT-XFEL network which now includes the large majority of potential X-FEL users, has the necessary leading edge expertise and has created a forum for discussions and information flow.

The following measures by the BE/OPT-XFEL network are regarded as necessary to increase the awareness of the Greek scientific community to the innovative potential of the X-FEL technology:

- Formal establishment of the Greek X-FEL users community.
- Establishment of contacts/collaborations with Greek companies that have been identified as potential users of the European X-FEL or that may be otherwise interested in the X-FEL technology.
- Organization at an annual base (at least until the European X-FEL becomes operational) of a workshop which will inform the Greek scientific community and companies about developments in the X-FEL field. The workshop will bring together Greek scientists interested in using the European XFEL with international experts, in order to review the state of the art in field, illustrate potential experiments with the XFEL technology, and outline the beam characteristics, associated instrumentation and data acquisition technology. The cost for this workshop is estimated to 30.000 €
- Establishment of collaborative links with Greek users communities linked with European Research Infrastructures (e.g. ELI / ELI-GR., HiPER, INSTRUMENT etc) that are complementary to the X-FEL technology. Joint development of concepts for the optimum use of these infrastructures by Greek research groups and companies.
- Fostering of cooperation among Greek X-FEL users and international groups on projects which will benefit from the X-FEL technology, and exploration of possibilities for international/national funding.

With these measures, there is every expectation that the Greek participation in the European X-FEL will be successful and beneficial for the country.

Η Ευρωπαϊκή Υποδομή *European X-ray Free Electron Laser (European X-FEL)* η οποία βρίσκεται υπό κατασκευή στο Αμβούργο, θα είναι η διεθνώς σημαντικότερη εγκατάσταση παραγωγής υπερ-βραχύχρονων παλμών ακτίνων X με μία λαμπρότητα που υπερβαίνει κατά ένα δισεκατομμύριο φορές την ισχυρότερη συμβατική πηγή ακτίνων X. Με τα παγκοσμίως μοναδικά χαρακτηριστικά της, η εγκατάσταση αυτή δημιουργεί εντελώς νέες ερευνητικές ευκαιρίες σε επιστήμονες ή χρήστες από την βιομηχανία.

Το European X-FEL θα παρέχει αρκετές πηγές παραγωγής παλμών ακτίνων X με διάφορα χαρακτηριστικά. Σε μερικές περιπτώσεις θα παράγεται ακτινοβολία X με χαρακτηριστικά δέσμης laser. Για την παραγωγή παλμών ακτίνων X, θα χρησιμοποιούνται παλμοί ηλεκτρονίων που θα επιταχύνονται σε υψηλές ενέργειες και θα διασχίζουν ειδικές διατάξεις μαγνητών. Στην διαδικασία αυτή τα σωματίδια θα εκπέμπουν ακτινοβολία η οποία θα αυτο-ενισχύεται οδηγώντας στην παραγωγή εξαιρετικά βραχύχρονων και ισχυρών παλμών ακτίνων X. Τα πειράματα με τους παλμούς ακτίνων X στο European X-FEL θα είναι όμοια στην βασική πειραματική τους διάταξη: Ανάλογα με τις απαιτήσεις του πειράματος οι παλμοί μπορούν να διευρυνθούν, να εστιαστούν, να φιλτραριστούν ή να εξασθενήσουν με την χρήση οπτικών στοιχείων όπως οπτικά φράγματα, σχισμές ή κρυστάλλους. Τα δείγματα θα τοποθετούνται σε ειδικό πειραματικό σταθμό όπου θα αλληλεπιδρούν με τους παλμούς ακτίνων X. Τα αποτελέσματα της αλληλεπίδρασης θα καταγράφονται με ειδικούς ανιχνευτές. Τα δεδομένα θα αποθηκεύονται και θα υφίστανται επεξεργασία πριν την ανάλυση τους. Οι ερευνητές μπορούν να παρακολουθούν την εξέλιξη του πειράματος από ειδικό χώρο ελέγχου.

Η έρευνα στο X-FEL καλύπτει ένα ευρύτατο φάσμα των φυσικών επιστημών, όπως Φυσική, Επιστήμη Υλικών, Νανοτεχνολογία, Χημεία και Δομική Βιολογία. Πιθανές τεχνολογικές εφαρμογές αφορούν την δημιουργία καινοτόμων νανοϋλικών, την κατανόηση μηχανισμών παθογένειας και την ανάπτυξη φαρμάκων κλπ.

Εκτιμάται ότι η διαθεσιμότητα των παλμών X με λαμπρότητα μέχρι 9 τάξεις μεγέθους ισχυρότερη από σημερινές πηγές φωτός τρίτης γενιάς, θα επιτρέψει την πραγματοποίηση πειραμάτων σε ένα ευρύτατο φάσμα επιστημονικών πεδίων. Σε αυτά περιλαμβάνονται π.χ. η παρακολούθηση ατομικών μεταβολών σε χρονική κλίμακα κάτω του ps κατά την διάρκεια χημικών αντιδράσεων και αλλαγών φάσης, ο προσδιορισμός τρισδιάστατων μακρομοριακών δομών χωρίς ανάγκη κρυστάλλωσης των μορίων κλπ. Αυτές οι περιοχές είναι εξαιρετικά σημαντικές για την Ελληνική επιστημονική κοινότητα. Η βέλτιστη όμως αξιοποίηση των μοναδικών δυνατοτήτων του X-FEL απαιτεί συστηματική προετοιμασία των Ελλήνων ερευνητών μέσω του Δικτύου BE/OPT-XFEL μέχρι την πλήρη ενεργοποίηση του European X-FEL που προγραμματίζεται για το 2014.

Το Ελληνικό Δίκτυο BE/OPT-XFEL

Το Δίκτυο BE/OPT-XFEL δημιουργήθηκε με στόχο να διευκολύνει την βέλτιστη αξιοποίηση του European X-FEL από τους Έλληνες ερευνητές. Το Δίκτυο περιλαμβάνει τώρα την πλειοψηφία των Ελλήνων δυνητικών χρηστών του X-FEL και έχει δημιουργήσει ένα φόρουμ ενημέρωσης για την τεχνολογία X-FEL. Οι στόχοι του Δικτύου είναι: **a)** Να συγκεντρώσει και να διαδώσει πληροφορίες για όλα τα τεχνολογικής, νομικής και οικονομικής φύσεως θέματα που θα επιτρέψουν βέλτιστη

χρήση του European X-FEL από την Ελληνική ερευνητική κοινότητα μέσω συνεδρίων, σεμιναρίων, διοργάνωσης συναντήσεων των εν δυνάμει χρηστών και ενός internet site. Επίσης να προωθήσει την διάχυση της πληροφορίας και στο ευρύτερο κοινό, πχ στα Ελληνικά ακαδημαϊκά Ιδρύματα **b)** Να δράσει ως καταλύτης για την ανάπτυξη ερευνητικών έργων στους τομείς που άπτονται άμεσα του X-FEL δημιουργώντας επαφές-συνεργασίες μεταξύ ειδικών του X-FEL από το εξωτερικό και χρηστών από την Ελλάδα, ώστε να εξασφαλισθεί ότι κατάλληλα Ελληνικά ερευνητικά προγράμματα θα ωριμάσουν επαρκώς μέχρι την ενεργοποίηση του European X-FEL. **c)** Να δραστηριοποιήσει τους πιθανούς Έλληνες χρήστες (από διάφορα πεδία όπως δομική βιολογία, τεχνολογία συγχροτρονίων, laser κλπ) και να υποβοηθήσει στην εξασφάλιση εθνικών/ευρωπαϊκών χρηματοδοτήσεων στα μέλη του Δικτύου μέσω συμμετοχής σε προκηρύξεις ανταγωνιστικών ερευνητικών προγραμμάτων που αφορούν το X-FEL.

ΒΑΣΙΚΕΣ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ ΤΗΣ ΕΛΛΗΝΙΚΗΣ ΚΟΙΝΟΤΗΤΑΣ ΧΡΗΣΤΩΝ ΤΟΥ EUROPEAN X-FEL

Λόγω της προθεσμίας για την παράδοση της παρούσας Μελέτης Σκοπιμότητας, τα αποτελέσματα της βασίζονται στον πρώτο γύρο της διανομής ερωτηματολογίου, πριν από οποιαδήποτε εκδήλωση της διάχυσης πληροφοριών (π.χ. την προγραμματισμένη διοργάνωση συνεδρίου). Παρά τον περιορισμό αυτό, πιστεύουμε ότι τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των συμπερασμάτων είναι ακριβή, και ο συνολικός αριθμός των ενδιαφερομένων ομάδων / ερευνητών πρόκειται να αυξηθεί στο μέλλον.

Συνολικά, 68 ελληνικές ερευνητικές ομάδες ή μεμονωμένοι ερευνητές (από 13 Πανεπιστήμια και Ερευνητικά Κέντρα) και μια εταιρεία που ενδιαφέρονται να χρησιμοποιήσουν το X-FEL ως εργαλείο έρευνας έχουν εντοπιστεί μέσω ενός ειδικά σχεδιασμένου ερωτηματολογίου που διανεμήθηκε στην Ελληνική επιστημονική κοινότητα (Παράρτημα C) . Αυτή η κοινότητα των δυνητικών χρηστών X-FEL είναι διάσπαρτη σε όλη την χώρα:

1. Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας (9 ομάδες / επιστήμονες από 3 Ινστιτούτα / Ηράκλειο και Πάτρα)
2. Πανεπιστήμιο Κρήτης (1 ομάδα / επιστήμονας / Ηράκλειο)
3. Πολυτεχνείο Κρήτης (1 ομάδα / Χανιά)
4. Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (2 ομάδες / Ιωάννινα)
5. Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας (2 ομάδες / επιστήμονες / Λάρισα και Καρδίτσα)
6. Πανεπιστήμιο Θράκης (1 ομάδα / Αλεξανδρούπολη)
7. Πανεπιστήμιο Αθηνών (8 ομάδες / επιστήμονες από 3 Τμήματα / Αθήνα)
8. Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών (4 ομάδες / επιστήμονες από 2 Τμήματα / Αθήνα)
9. Πανεπιστήμιο Πατρών (7 ομάδες / επιστήμονες από 2 Τμήματα / Πάτρα)
10. ΕΚΕΦΕ "ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ" (12 ομάδες / επιστήμονες από 5 Ινστιτούτα / Αθήνα)
11. Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών (19 επιστήμονες από 3 Ινστιτούτα / Αθήνα)
12. Ελληνικό Ινστιτούτο Παστέρ (1 ομάδα / Αθήνα)
13. Τ. Ε. Ι. Πάτρας (1 ομάδα / Πάτρα)
14. Πρίσμα Ηλεκτρονικά ABEE, Αλεξανδρούπολη

Η επιστημονικές εξειδικεύσεις των ομάδων αυτών επικαλύπτονται απολύτως με τις κύριες κατευθύνσεις του European X-FEL και περιλαμβάνουν Βιολογία (δομικήςβιολογία, της πρωτεϊνική μηχανική, βιοϊατρικές εφαρμογές κλπ), Επιστήμη Υλικών (graphene, νανοσωλήνες άνθρακα, τα πολυμερή κ.λ.π.), Νανοτεχνολογία (νανοϋλικά, βιομιμητικά υλικά κλπ) , Βιοχημεία & Ενζυμολογία, Χημεία (*in silico* και *in vitro* Χημεία, φαρμακευτική Χημεία, βιοδραστικά μόρια), και Φυσική

(Ατομική Φυσική, γρήγορες ατομικές διεργασίες, Φυσική επιφανειών κ.λπ.). Μια πλήρης παρουσίαση των εξειδικεύσεων αυτών των ομάδων παρουσιάζεται στο Προσάρτημα C. Περίπου 40% των ερευνητών / ομάδων ταυτίζονται με περισσότερα από ένα επιστημονικά πεδία. Το ενδιαφέρον για το X-FEL κατανέμεται μεταξύ Βιολογίας (22%), Φυσικής (19%), Χημείας (31%) και Υλικών (26%).

Πληροφορίες για τις ερευνητικές υποδομές που χρησιμοποιούνται από αυτές τις ομάδες (διαθέσιμες τοπικά ή προσβάσιμες σε διεθνές επίπεδο), έχουν συλλεχθεί (Παράρτημα C) και αναλύθηκαν υπό το πρίσμα της «συμπληρωματικότητας προς το X-FEL», δηλαδή τον βαθμό στον οποίο η πλατφόρμα τεχνολογίας X-FEL μπορεί συμπληρώσει αυτές τις υποδομές, επιτρέποντας καινοτόμες πειραματικές προσεγγίσεις που δεν μπορεί να πραγματοποιηθούν με συμβατικές μεθόδους. Οι τοπικά διαθέσιμες υποδομές που αναφέρονται από τις περισσότερες ομάδες παρέχουν επαρκή βάση για την έναρξη / ανάπτυξη ερευνητικών προγραμμάτων που μπορούν να οδηγήσουν σε πειράματα στο European X-FEL. Επιπλέον, πολλές ομάδες χρησιμοποιούν ήδη ευρωπαϊκές ερευνητικές υποδομές, π.χ. συγχροτρόνια (BESSY II, DESY, ESRF κλπ), ή το Ευρωπαϊκό Laserlab, κλπ. που είναι συμπληρωματικά προς το X-FEL. Η έρευνα των ομάδων αυτών χρηματοδοτείται κυρίως από εθνικά και κοινοτικά προγράμματα, και σε λίγες περιπτώσεις από επιχειρήσεις. Τα ενδιαφέροντα αυτών των ομάδων σε σχέση με το X-FEL (όσον αφορά μελλοντικά πειράματα), καθώς και αναδυόμενες ερευνητικές ανάγκες που αφορούν το European X-FEL έχουν ταυτοποιηθεί και περιλαμβάνονται αναλυτικά στο συνημμένο ερωτηματολόγιο (Παράρτημα C). Όταν τους ζητήθηκε να εκτιμηθεί σε κλίμακα 0-10 τα οφέλη της τεχνολογίας X-FEL για τη διεθνή ανταγωνιστικότητα της έρευνάς τους (0 = κανένα όφελος, 10 = πάρα πολύ μεγάλο όφελος), ο μέσος όρος των απαντήσεων ήταν 7,9. Οι ασχολούμενοι με Πανεπιστημιακό διδακτικό έργο, αναμένουν στην συντριπτική πλειοψηφία ότι το European X-FEL θα έχει θετικό αντίκτυπο στις διδακτικές τους δραστηριότητες. Στις περισσότερες περιπτώσεις, οι ερευνητές τάσσονται υπέρ της συμμετοχής των ελληνικών επιχειρήσεων στο έργο της Ευρωπαϊκής X-FEL (με συγκεκριμένες προτάσεις), αν και μερικοί θεωρούν ότι αυτό στο παρόν στάδιο είναι πρόωρο.

ΤΟ ΣΗΜΕΡΙΝΟ ΕΠΙΠΕΔΟ ΓΝΩΣΕΩΝ-ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΩΝ ΕΞΕΛΙΞΕΩΝ ΣΕ ΣΧΕΣΗ ΜΕ ΤΟ X-FEL

Η τεχνολογία XFEL θα επιτρέψει ένα ευρύ φάσμα από πρωτοπόρα πειράματα - που αφορούν αναλύσεις της δομής των βιομορίων, παρακολούθηση χρονικά της εξέλιξης χημικών αντιδράσεων ή έρευνες σε ακραίες καταστάσεις της ύλης. Αυτές οι νέες δυνατότητες συμπίπτουν απόλυτα με τα ερευνητικά ενδιαφέροντα και τις ανάγκες των Ελλήνων χρηστών, όπως αυτές προσδιορίστηκαν με το συνημμένο ερωτηματολόγιο (Παράρτημα C). Οι τομείς της διεπιστημονικής έρευνας όπου οι ελληνικές ομάδες μπορούν να επωφεληθούν πολύ από το European X-FEL περιλαμβάνουν:

• Αποκρυπτογράφηση της δομής των βιομορίων

Χρησιμοποιώντας τους παλμούς ακτίνων X του Ευρωπαϊκού XFEL, οι επιστήμονες μπορούν να αποκρυπτογραφήσουν την τρισδιάστατη δομή των βιομορίων, των συστατικών των κυττάρων ή ολόκληρους ιούς. Αυτό θα αποτελέσει τη βάση για τον σχεδιασμό των φαρμάκων του μέλλοντος.

• Νανοτεχνολογία

Οι παλμοί ακτίνων X του Ευρωπαϊκού XFEL επιτρέπουν να εξαχθούν τρισδιάστες δομικές πληροφορίες σε κλίμακα nm και θα υποβοηθήσουν σημαντικά μελλοντικές νανοτεχνολογικές εφαρμογές.

• **Παρακολούθηση χημικών αντιδράσεων**

Με παλμούς ακτίνων X του Ευρωπαϊκού XFEL, οι ερευνητές μπορούν να παρακολουθήσουν την χρονική εξέλιξη της αναδίπλωσης μορίων ή το πώς αυτά επιτελούν τις διάφορες βιολογικές λειτουργίες στα κύτταρα. Η γνώση αυτή μπορεί να συμβάλει στην παραγωγή εξειδικευμένων χημικών ουσιών και να συνεισφέρει σημαντικά στην πρόοδο στον τομέα της ιατρικής.

• **Μαγνητισμός**

Οι παλμοί ακτίνων X του Ευρωπαϊκού XFEL επιτρέπουν την κατανόηση σημαντικών ιδιοτήτων του μαγνητισμού - με άμεσες εφαρμογές σε τεχνολογίες αποθήκευσης δεδομένων.

• **Ατομα/μόρια/νανοσωματίδια σε ισχυρά πεδία**

Το European XFEL θα δημιουργήσει μοναδικές διεθνώς προϋποθέσεις για την μελέτη ατόμων, μορίων ή νανοσωματιδίων σε εξαιρετικά ισχυρά πεδία ακτίνων -X. Η κατανόηση των αλληλεπιδράσεων που προκύπτουν θα προάγει σημαντικά όχι μόνο την βασική έρευνα, αλλά θα οδηγήσει και σε νέα προϊόντα - όπως καινοτόμοι καταλύτες ή ηλεκτρονικές συσκευές που θα ελέγχονται από ακτινοβολία ακτίνων X.

• **Ακραίες καταστάσεις της ύλης**

Εστιασμένοι παλμοί ακτίνων X του XFEL μπορούν να δημιουργήσουν καταστάσεις της ύλης κάτω από εξαιρετικά υψηλές πιέσεις και θερμοκρασίες. Αυτό θα βοηθήσει την έρευνα στον χώρο της Αστροφυσικής και την έρευνα σε τεχνολογίες σύντηξης ως μελλοντικής πηγής ενέργειας.

Λεπτομέρειες σχετικά με το επίπεδο επιστημονικών εξελίξεων σε διεθνές επίπεδο σε επιλεγμένες εφαρμογές του XFEL οι οποίες αφορούν άμεσα την Ελληνική επιστημονική κοινότητα αναφέρονται στο Προσάρτημα Β.

ΚΟΣΤΟΣ & ΟΦΕΛΗ

Η συμφωνία των μετόχων της European XFEL GmbH για την οποία απαιτείται έγκριση από το Ελληνικό Κοινοβούλιο, προβλέπει ότι ελληνική συμβολή στο κόστος κατασκευής της εγκατάστασης ανέρχεται στα 4.000.000 € (European XFEL GmbH shareholder agreement, <http://www.xfel.eu/news/2009/20091130/>). Οι πιθανές δαπάνες χρήσης του ευρωπαϊκού X-FEL από τις Ελληνικές ομάδες εκτιμήθηκαν με την βοήθεια των ερωτηματολογίων που συνέταξε το δίκτυο BE/OPT-XFEL. Παρά τις διακυμάνσεις μεταξύ διαφόρων επιστημονικών κλάδων, εκτιμάται ότι η πρόσβαση στο ευρωπαϊκό X-FEL θα δημιουργήσει πρόσθετο ετήσιο κόστος στους προϋπολογισμούς της έρευνας των επιμέρους ομάδων της τάξης των 5800 € για μετακινήσεις και διαμονή και 5500 € για αναλώσιμα. Οι πρόσθετες αυτές δαπάνες αφορούν το συγκεκριμένο έτος κατά το οποίο η εγκατάσταση θα χρησιμοποιείται από την εκάστοτε ομάδα. Επιπλέον θα απαιτηθεί μία (μη επαναλαμβανόμενη) επένδυση της τάξεως των 900.000 € για διάφορους εξοπλισμούς. Κατά συνέπεια από το 2014, και με βάση την μάλλον αισιόδοξη υπόθεση ότι 15 ελληνικές ομάδες, πρόκειται να χρησιμοποιούν το Ευρωπαϊκό X-FEL ανά έτος, προκύπτει ένα ανώτατο ετήσιο όριο των πρόσθετων δαπανών για μετακινήσεις και αναλώσιμα της τάξεως των 170.000 € για την Ελληνική επιστημονική κοινότητα που θα κάνει χρήση της υποδομής X-FEL. Είναι πολύ πιθανό ότι ένα μεγάλο μέρος από αυτά τα πρόσθετα έξοδα θα καλυφθούν μέσω Ευρωπαϊκών και Εθνικών ερευνητικών προγραμμάτων, καθώς η συμμετοχή των ελληνικών ομάδων στο Ευρωπαϊκό X-FEL θα ενισχύσει σημαντικά την ανταγωνιστικότητά τους στην προσέλκυση ερευνητικών χρηματοδοτήσεων.

Στο παρόν στάδιο, τα αναμενόμενα οφέλη που προκύπτουν από την Ελληνική συμμετοχή στο European X-FEL (επιλεγμένα οφέλη που σχετίζονται άμεσα με τις προτεραιότητες της Ελληνικής επιστημονικής κοινότητας απαριθμούνται στο

Παράρτημα Β) συνδέονται κυρίως με την παραγωγή επιστημονικής γνώσης και κατ'επέκταση με την καινοτομία. Καθώς το X-FEL δημιουργεί τις προϋποθέσεις για την πραγματοποίηση επαναστατικών επιστημονικών πειραμάτων τα οποία αλλιώς δεν θα ήταν δυνατά, η ελληνική επιστημονική κοινότητα θα τεθεί στην πρώτη γραμμή της προαγωγής της έρευνας διεθνώς. Παράλληλα, οι δραστηριότητες αυτές θα βοηθήσουν την χώρα ενισχύοντας σημαντικά την τεχνολογική της βάση. Το European X-FEL θα δημιουργήσει ένα επιστημονικό περιβάλλον που θα προσελκύσει επιστήμονες υψηλού επιπέδου από όλο τον κόσμο και θα δημιουργήσει πολλαπλές αλληλεπιδράσεις μεταξύ διαφορετικών επιστημονικών κλάδων. Το περιβάλλον αυτό θα είναι πολύ γόνιμο για τους Ελληνική επιστήμονες οι οποίοι θα πραγματοποιήσουν έρευνα στο X-FEL, αφού τέτοιες αλληλεπιδράσεις αποτελούν κατά κανόνα τον καταλύτη για ένα πλήθος νέων ιδεών που οδηγούν σε καινοτομία και εφαρμογές.

Σε μεσο- έως μακροπρόθεσμη βάση, οι ελληνικές επιχειρήσεις αναμένεται επίσης να επωφεληθούν από τις ευκαιρίες που προσφέρει το European X-FEL. Ήδη κατά το παρόν στάδιο, μία εταιρεία από την Αλεξανδρούπολη (Πρίσμα Ηλεκτρονικά ABEE) έχει εκφράσει έντονο ενδιαφέρον για συμμετοχή στο κατασκευαστικό έργο του X-FEL. Αρκετές άλλες εταιρείες (π.χ. φαρμακευτικές, βιοτεχνολογικές, εταιρείες ανάπτυξης λογισμικού κλπ.), έχουν εντοπιστεί οι οποίες θα μπορούσαν επίσης να επωφεληθούν για το European X-FEL (APIVITA, BIANEE, KOPPEΣ, GENEKOR, BIOVISTA, REGULON).

Δεδομένου ότι οι δυννητικοί χρήστες του X-FEL και εταιρείες που εντοπίστηκαν είναι εγκατεστημένοι σε όλες τις περιοχές της χώρας, οι αναμενόμενες κοινωνικο-οικονομικές επιπτώσεις από την παραγωγή γνώσης και της καινοτομίας μέσω του του X-FEL θα αποβούν ευεργετικές τόσο σε εθνικό όσο και περιφερειακό επίπεδο. Το οφέλη από το X-FEL εναρμονίζονται συνεπώς πλήρως με τον στόχο σύγκλισης των περιφερειών της Ευρωπαϊκής Ένωσης (δες επίσης http://ec.europa.eu/regional_policy/atlas2007/fiche_index_en.htm).

Στο παρόν στάδιο, δεν υπάρχουν νομικά κωλύματα ή δυσμενείς νομικές επιπτώσεις σε σχέση με την συμμετοχή της Ελλάδα στο European XFEL GmbH shareholder agreement. Όπως προαναφέρθηκε εκκρεμεί η κύρωση της συμφωνίας αυτής από το Ελληνικό Κοινοβούλιο.

ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

Από την παραπάνω ανάλυση καθίσταται προφανές ότι με την συμμετοχή της Ελλάδας στο European XFEL τα εθνικά κονδύλια για την έρευνα επιβαρύνονται με μία μεσαίου μεγέθους πρόσθετη δαπάνη (4.0 Μ€ κόστος κατασκευής της εγκατάστασης και 0.9 Μ€ κόστος αναγκαίου εξοπλισμού Ελλήνων χρηστών). Επιπροσθέτως θα απαιτηθούν ετησίως από το 2014 μέχρι 0.17 Μ€ για την πραγματοποίηση μετρήσεων στο X-FEL από την Ελληνική επιστημονική κοινότητα. Αν υλοποιηθεί αυτή η επένδυση, τα χρήματα αυτά θα ενισχύσουν σημαντικά την ελληνική επιστήμη, καθώς θα δημιουργήσουν την βάση για επαναστατικές ερευνητικές ανακαλύψεις από Έλληνες ερευνητές, με επιπτώσεις όχι μόνο στον τομέα της βασικής έρευνας, αλλά και στην ανάπτυξη καινοτόμων προϊόντων / εφαρμογών ή την σημαντική βελτίωση των προϊόντων από την ελληνικές ερευνητικές ομάδες και επιχειρήσεις. Η προώθηση της επιστημονικής αριστείας και της κινητικότητας των Ελλήνων ερευνητών, μέσω του X-FEL θα είναι επίσης ένα σημαντικό όφελος. Τα αναμενόμενα επιστημονικά αποτελέσματα θα δώσουν σημαντική ώθηση στην παραγωγή καινοτομίας και αναμένεται να έχουν οικονομικά και κοινωνικά οφέλη για τη χώρα, τις περιφέρειες και τις πόλεις που φιλοξενούν τις επιστημονικές ομάδες και επιχειρήσεις που θα χρησιμοποιούν το X-FEL. Έτσι, σε μια

μέσο- έως μακροπρόθεσμη βάση, τα επιστημονικά επιτεύγματα που θα προκύψουν από το X-FEL θα έχουν θετικό οικονομικό αντίκτυπο, με την ενίσχυση τομέων της οικονομίας που βασίζονται στην παραγωγή γνώσης. Οι ελληνικές επιχειρήσεις και ο ιδιωτικός τομέας θα έχουν μακροπρόθεσμα σημαντικά οφέλη από τις εξελίξεις που δρομολογεί το X-FEL. Ήδη, το Institute for Allocation and Competition (University of Hamburg) έχει διαπιστώσει θετικές επιπτώσεις από X-FEL (ακόμη και σε ένα πολύ πρώιμο στάδιο μετά την εκκίνηση του έργου), σε ένα ευρύ φάσμα των ευρωπαϊκών εταιρειών (<http://www.xfel.eu/en/economic-impact/>), οι οποίες μέσω της συμμετοχής της Ελλάδας δημιουργούν ευκαιρίες και για τις ελληνικές επιχειρήσεις.

Για να υλοποιηθούν όμως οι θετικές επιπτώσεις European X-FEL στην Ελλάδα, απαιτείται επαρκής προετοιμασία της ελληνικής επιστημονικής κοινότητας και ιδιωτικού τομέα. Η προετοιμασία αυτή μπορεί να υλοποιηθεί μόνο μέσω του δικτύου BE/OPT-XFEL δίκτυο, και είναι εξαιρετικά κρίσιμης σημασίας, τουλάχιστον για την διάρκεια της μεταβατικής περιόδου μέχρι το European X-FEL να καταστεί πλήρως λειτουργικό (2014). Σημαντική προτεραιότητα του Δικτύου είναι να προσδιοριστούν σημαντικά εμπόδια (π.χ. έλλειψη διεθνών συνεργασιών και ροής πληροφοριών) που ενδέχεται να έχουν αρνητικές επιπτώσεις στην βέλτιστη αξιοποίηση της υποδομής X-FEL από τους Έλληνες επιστήμονες.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η παρούσα μελέτη σκοπιμότητας καταλήγει στο συμπέρασμα ότι τα οφέλη από την Ελληνική συμμετοχή στο European X-FEL, τόσο από την άποψη της παραγωγής επιστημονικής γνώσης και καινοτομίας όσο και της τεχνολογικής εκμετάλλευσης (η οποία θα προετοιμάσει το έδαφος για νέα προϊόντα και τεχνολογίες από ελληνικές ερευνητικές ομάδες και εταιρείες), υπερσχύουν σαφώς έναντι του κόστους.

Προϋπόθεση για την αξιοποίηση των ευκαιριών που προσφέρονται από το X-FEL, είναι η επαρκής προετοιμασία των επιστημονικής κοινότητας και των επιχειρήσεων κατά το διάστημα που μεσολαβεί μέχρι το European X-FEL γίνει πλήρως λειτουργικό για την καλύτερη δυνατή χρήση της μεγάλης αυτής ερευνητικής υποδομής. Η βέλτιστη προετοιμασία για το Ευρωπαϊκό X-FEL σε εθνικό επίπεδο μπορεί να συντονισθεί από το δίκτυο BE/OPT-XFEL το οποίο περιλαμβάνει πλέον την πλειοψηφία των δυνητικών χρηστών της εγκατάστασης στην Ελλάδα, διαθέτει την απαραίτητη τεχνογνωσία και έχει δημιουργήσει ένα φόρουμ για συζητήσεις και ανταλλαγή πληροφοριών.

Τα ακόλουθα μέτρα του δικτύου BE/OPT-XFEL θεωρούνται αναγκαία για την ευαισθητοποίηση της ελληνικής επιστημονικής κοινότητας σχετικά με το δυναμικό της τεχνολογίας X-FEL σε θέματα καινοτομίας και επιστημονικής αριστείας:

- Επίσημη ίδρυση της ελληνικής κοινότητας χρηστών του X-FEL.
- Ενεργοποίηση επαφών / συνεργασιών με ελληνικές επιχειρήσεις που αποτελούν δυνητικούς χρήστες του ευρωπαϊκού X-FEL ή που ενδιαφέρονται για θέματα τεχνολογίας X-FEL.
- Διοργάνωση σε ετήσια βάση (τουλάχιστον έως ότου το Ευρωπαϊκό X-FEL αρχίσει την λειτουργία του) συνεδρίου το οποίο θα ενημερώνει την ελληνική επιστημονική κοινότητα και τις επιχειρήσεις σχετικά με τις εξελίξεις στον τομέα X-FEL. Στο συνέδριο θα συμμετέχουν Έλληνες επιστήμονες που ενδιαφέρονται να χρησιμοποιήσουν το XFEL και διεθνείς εμπειρογνώμονες, οι οποίοι θα παρουσιάσουν την πρόοδο της τεχνολογίας στον τομέα XFEL, τεχνικά

χαρακτηριστικά, πειραματικά αποτελέσματα κλπ . Το κόστος για αυτό το συνέδριο εκτιμάται στα 30.000 €

- Δημιουργία συνεργασιών με άλλες Ελληνικές κοινότητες των χρηστών που συνδέονται με ευρωπαϊκές ερευνητικές υποδομές (π.χ. ELI / ELI-GR., Hiper, INSTRUCT κλπ), που είναι συμπληρωματικές με την τεχνολογία X-FEL. Σχεδιασμός από κοινού των αρχών και μεθοδολογιών για την βέλτιστη χρήση των εν λόγω υποδομών από τις Ελληνικές ερευνητικές ομάδες και επιχειρήσεις.
- Προώθηση της συνεργασίας μεταξύ των Ελλήνων χρηστών X-FEL και άλλων ερευνητών σε διεθνές επίπεδο για ερευνητικά έργα τα οποία θα ωφεληθούν από την τεχνολογία X-FEL, καθώς και διερεύνηση των δυνατοτήτων για διεθνή/ εθνική χρηματοδότηση.

Με αυτά τα μέτρα, υπάρχει υψηλή πιθανότητα ότι η Ελληνική συμμετοχή στην Ευρωπαϊκή εγκατάσταση X-FEL θα είναι επιτυχής και επωφελής για τη χώρα.

Appendix A

State-of-the art in ultra-fast diffractive imaging with X-ray lasers

Theory predicts that with an ultra-short and extremely bright coherent X-ray pulse, a single diffraction pattern may be recorded from a large macromolecule, a virus, or a cell before the sample explodes and turns into a plasma. The over-sampled diffraction pattern permits phase retrieval and hence structure determination. The first free-electron lasers capable to deliver ultra bright and very short X-ray pulses for such experiments have recently started operations. These are the most brilliant sources of X-rays to date, exceeding the peak brilliance of conventional synchrotrons by a factor of 10 billion, and improving. In the duration of a single flash, the beam focused to a micron-sized spot has the same power density as all the sunlight hitting the Earth, focused to a millimetre square. The interaction of an intense X-ray pulse with matter is profoundly different from that of an optical pulse. A necessary goal of the programme is to explore photon-material interactions in strong X-ray fields. The aim in biology is to step beyond conventional damage limits and develop the science and technology required to enable high-resolution imaging of biological objects. Eligible targets include single virus particles, organelles, cells, nanocrystals, engineered nanoclusters and isolated macromolecules. The challenges engage an interdisciplinary approach, drawing upon structural sciences, biology, atomic and plasma physics, optics and mathematics. The potential for breakthrough science is great with impact not only in biology or physics but wherever dynamic structural information with high spatial and temporal resolution is valuable. The overall relevance of the X-FEL technology extends beyond basic science, to technologies of essential importance to a future Greece and Europe.

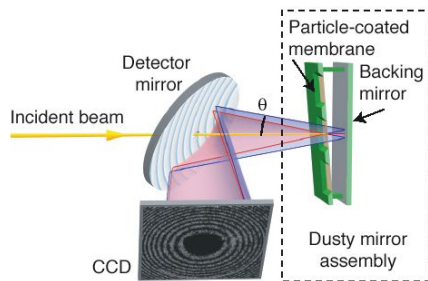
Summary of recent results

Over the past five years, experiments at SPPS (the Short Pulse Photon Source, Stanford), FLASH (Hamburg), ALS (Advanced Light Source, Berkeley), FLASH (DESY, Hamburg), and recently also at the LCLS (the Linac Coherent Light Source at Stanford) have allowed to refine concepts, and to identify new research opportunities. A great deal of experience has been amassed on how to acquire low-noise diffraction data with ultra-short pulses from objects in the gas, liquid, and solid phases. Analysis tools have been developed to generate two- and three-dimensional images from coherent diffraction data, and developed new concepts in phase retrieval and holography. Several research groups have explored the limits of imaging biological materials under the conditions of long-wavelength X-ray pulses at FLASH, and are starting to do the same at shorter wavelengths at the LCLS. So far no reason has been discovered why the initial predictions of near atomic resolution imaging of particles will not work. The signs are that the conventional handicap of X-rays over electrons in imaging can be reversed and made into a net gain with ultra-short and extremely intense X-ray pulses. New avenues have been opened up of imaging and new methodologies to reach those goals. A rapidly growing new scientific community has been established. The capabilities arising at LCLS and XFEL, such as variable pulse duration, a low-charge mode that gives *less than 3 fs pulses* without the corresponding loss of photons, and chirping of pulses, opens up even more new possibilities for the exploration of the structure and dynamics of biological and other objects.

Highlights:

1st flash diffraction experiments show imaging "beyond the edge" is possible. In 2006, coherent flash diffraction was successfully demonstrated with an extremely intense and very short photon pulse from the VUV-FEL soft X-ray free-electron laser

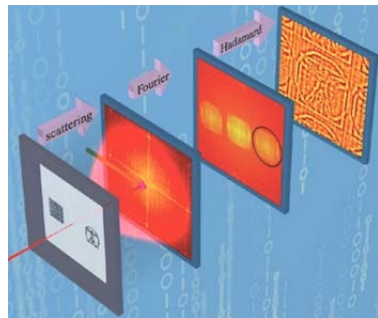
in Hamburg (Chapman et al. 2006). The FEL pulse produced an interpretable diffraction pattern from a nano-structured non-periodic object, before destroying it at 60,000 K. The reconstructed image, obtained directly from the coherent diffraction pattern by phase retrieval through over-sampling, shows no measurable damage. Significant damage occurred only about 2 ps after the 15 fs long pulse had left the sample (Chapman et al., 2007). These results validate the general concept of flash diffractive imaging.



Femtosecond time-delay X-ray holography to monitor sample explosion. When and how did the sample explode in the imaging experiment above? A holographic measurement scheme was invented, inspired by Newton's “dusty mirror” experiment to monitor the X-ray-induced explosion of microscopic objects. The holographic movie shows explosion delayed by 2 ps after the 15 fs long shot. Time-delay

holography offers the possibility to monitor ultra-fast processes with unprecedented resolution in space and time. The time delay is directly encoded in the diffraction pattern to an accuracy of better than a femtosecond, and the sample depth is holographically recorded to sub-wavelength accuracy. This allows the observation of so far inaccessible processes in X-ray physics (Chapman et al., 2007), and opens up new possibilities for time resolved studies.

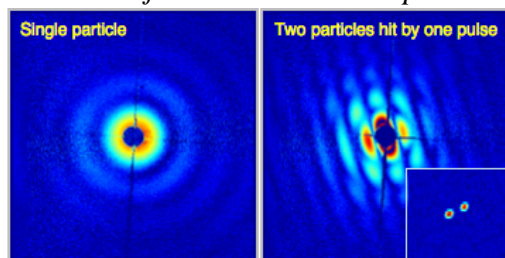
Massively parallel X-ray holography with uniformly-redundant arrays. A uniformly



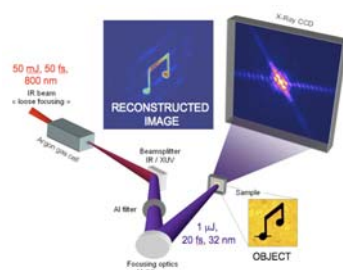
redundant array (URA) placed next to the sample multiplies the efficiency of X-ray Fourier transform holography by more than three orders of magnitude and provides holographic images with both amplitude- and phase-contrast information. The maximal spatial resolution in these experiments is not limited by the nanofabrication/characterisation limits of the URAs. Image reconstruction at resolutions beyond the nanofabrication limits is possible by combining the URA-based holographic reconstruction with iterative

phase-retrieval methods. This avoids the uniqueness problem, guides the iterative reconstruction by assuring a robust and reliable convergence, and extends the spatial resolution in the reconstruction to the diffraction limit for both the object and the URA (Marchesini et al. 2008).

Particles injected into the FEL pulse. Particles injected into the FEL beam 'on the fly'



can be imaged. The flash diffraction pattern is from a spherical DNA-sugar complex of 200 nm in diameter. This particle was injected into the beam and caught by the FEL pulse. The pattern on the right shows two particles captured simultaneously (similar to Young slits). The two particles could be reconstructed from this pattern (Bogan et al., 2008).



First single-shot imaging experiments with a table-top X-ray laser. Prof. Hajdu's team has performed the 1st single-shot diffractive imaging experiment with a table-top laser harmonic source (hence the sample). Up to now, such experiments have been limited to intense

coherent pulses from free-electron lasers. The results demonstrate that optically-driven X-ray sources offer alternative possibilities in ultra-fast imaging (Ravasio et al. 2009).

References:

- Bergh, M., et al. Feasibility of imaging living cells at sub-nanometer resolution by ultrafast X-ray diffraction. *Quar. Rev. Biophys.* 41, 181-204 (2008).
- Chapman, H. N., et al., Femtosecond diffractive imaging with a soft-X-ray free-electron laser. *Nature Physics* 2, 839-843 (2006).
- Chapman, H.N., et al. Femtosecond Time-Delay X-ray Holography. *Nature* 448, 676–679 (2007)
- Maia, F.R.N.C., et al. Structural variability and the incoherent addition of scattered intensities in single-particle diffraction”, *Physical Reviews E* 80, Article Number: 031905 (2009).
- Marchesini, S., et al. Massively parallel X-ray holography. *Nature Photonics* 2, 560-563 (2008).
- Ravasio, A. et al. Single-shot diffractive imaging with a table-top femtosecond soft X-ray laser-harmonics source. *Physical Review Letters* 103, 028104 (2009).

Appendix B

Research benefits to the Greek scientific community

The interdisciplinary research at the European XFEL will provide invaluable insights for many scientific disciplines. Experience shows that this kind of basic research leads to important applications. The unique research opportunities at the European XFEL will attract top-level scientists from all over the world. This will bring very different scientific disciplines together, which will challenge and foster one another. Experience shows that such an interplay stimulates a multitude of ideas leading to concrete products and improvements of products. There is every expectation that Greek groups involved at the European XFEL will also strongly benefit from this scientific exchange

The X-FEL facility will benefit many scientific fields – among them medicine, pharmacy, chemistry, physics, materials science, nanotechnology, energy technology and electronics which are highly relevant to the Greek community of potential X-FEL users identified by the BE/OPT-XFEL project (see Appendix C). An outline of these fields follows:

Physics

Several partners (Appendix C) have important experience and expertise on high intensity electromagnetic (elm) interaction with matter. This scientific area address questions of fundamental significance for non-linear physical process and exotic phenomena exploration such as the multiphoton interaction of intense XUV elm with atoms molecules and ions with few-electrons, Auger processes in multielectron atoms, dissociation of small poly-atomic molecules. Exotic phenomena concern the pair production from vacuum and the generation of ultra-intense magnetic fields the highest observed on earth. Investigations for instrumentation development will be performed for high resolution spectrometers and detector calibration. The wiggler technology transfer will be a fundamental topic of collaboration. The different physics research teams involved to the XFEL-GR project belong to self-sufficient units with their own research and engineering facilities such as mechanical, electrical and electronic workshops, CAD and computer animation facilities in order to improve technical design and construction of analytical instruments, electronic devices and software. Briefly, the teams research facilities and equipment include different types of pulsed laser systems (fsec Ti:Sapphire, nsec Nd:Yag, Excimer and dye lasers), high accuracy electronics, computers, plotters, vacuum systems and the workshop equipped with precision instruments. All the above assure the establishment of scientific research programs of high quality, allow the development of new technologies and justify the requested budget (Appendix-C).

Biology, medicine and pharmacy

Using X-ray crystallography scientists have gained deep insights into the world of life – but the solutions to many mysteries are still due. The X-ray flashes of the European XFEL will enable scientists to analyse the structure of many more biomolecules and biological entities such as cells or membranes than is possible today. What's more, they can also study their temporal behaviour. Research at the European XFEL will thus lead to a better understanding of viruses. This will provide an important basis for future medicines.

Chemistry

Catalysis plays an important role in more than half of the chemical substances produced in industry. Nevertheless, little is known about how it comes about on the atomic level, much like many other chemical processes awaiting to be better understood on the level of atomic details. Finding optimizations here will result in more efficient production mechanisms and new products. The X-ray flashes of the European XFEL will allow scientists to film chemical reactions with unprecedented precision. This will improve our knowledge of these processes significantly.

Materials science

Interdisciplinary research has produced completely new materials, including bio-inspired ones. Whether with respect to durability, conductivity or magnetization – the properties of materials can be better and better tailored to specific needs. This development has been decisively driven by research using intense radiation. Research with the X-ray flashes of the European XFEL will help to improve the properties of known materials and find completely new materials with revolutionary characteristics.

Electronics

Faster chips and hard discs providing more memory require an ever better understanding and optimization of the properties of materials. Research at the European XFEL will provide new insights into the nanoworld, into magnetism and the properties of materials – with possible applications for faster computers and more data storage capacity.

Nanotechnology

Nanomaterials have reached our everyday life. Such materials have structures of the order of down to 100 nanometres, i.e. 100 billionths of a metre. At this level, materials such as copper, gold or silicon exhibit surprising new properties, becoming for instance transparent, liquid or conductive. The shortwave X-ray flashes of the European XFEL are ideally suited to study such nanostructures – to explore their spatial structure and investigate their temporal behaviour. They will thus lay the foundation for tomorrow's technologies.

Environmental research

Many processes in our environment are determined by substances in which molecules comprising light elements such as carbon, oxygen or nitrogen play a major role. Understanding the function of these molecules better would enable deeper insights into these everyday processes. However, many properties of these molecules cannot be studied yet under normal environmental conditions. The intense X-ray flashes of the European XFEL offer a new access that will for the first time enable analyses of a large class of substances that are important for environmental research.