

## GROSSGERÄTE

# Neutronen für die Forschung

Die Spallationsneutronenquelle SNS bietet neue Chancen für die Erforschung der kondensierten Materie

Frank Klose, Norbert Holtkamp und Dieter Richter

In den USA wurde im April 2006 die erste gepulste Neutronenquelle in Betrieb genommen, die Neutronen mithilfe eines Megawatt-Protonenbeschleunigers erzeugt. Ihr effektiv nutzbarer Teilchenfluss wird die bisherigen Spitzenwerte von Reaktoren deutlich übertreffen. Wird diese Quelle die Forschung mit Neutronen revolutionieren?

Neutronen zeichnen sich durch eine besondere Kombination von Eigenschaften aus, die sie zu einer einzigartigen Sonde für die Untersuchung von kondensierter Materie machen. Dazu gehört unter anderem, dass sie elektrisch neutral sind, ein magnetisches Moment besitzen und sie stark an leichten Elementen wie Wasserstoff und Sauerstoff streuen und dabei empfindlich auf verschiedene Isotope sind. Daher wächst ihre Bedeutung für immer mehr Wissenschaftsfelder, von den Material- zu den Geowissenschaften, von der Chemie zum Ingenieurwesen, von der Festkörperphysik zur Biologie und Medizin kontinuierlich an. Neutronenstreuung macht Strukturen von Pikometern bis Mikrometern und Bewegungen auf Zeitskalen von Pikosekunden bis Mikrosekunden der Untersuchung zugänglich. Mit abbildenden und kinematischen Verfahren werden noch größere Strukturen und langsamere Bewegungen sichtbar. Dieses große Raum- und Zeitfenster, die hohe Eindringtiefe, die Zerstörungsfreiheit und die Möglichkeit zur Kontrastvariation sowie die Empfindlichkeit auf magnetische Phänomene sind die Gründe dafür, dass die Neutronen innerhalb der Forschung kondensierter Materie so einzigartig und unersetzlich sind.

Seit über 60 Jahren dienen Forschungsreaktoren, in denen Neutronen durch Kernspaltung entstehen, als Neutronenquellen. In den letzten beiden Jahrzehnten ist jedoch mit der Spallation eine alternative Methode zur Neutronenerzeugung in den Mittelpunkt des Interesses gerückt. Ähnlich wie Steine beim Aufschlag eines Hammers zersplittern,<sup>1)</sup> zerschmettern dabei Protonen mit hoher Energie (typischerweise einige hundert MeV) Atomkerne eines Targets, wobei auch Neutronen freigesetzt werden.

Die kürzlich in Betrieb gegangene Spallation Neutron Source (SNS) in Oak Ridge, USA, ist die weltweit erste gepulste Megawatt-Spallationsneutronenquelle (Abb. 1). Nach einer Bauzeit von sieben Jahren und Gesamtkosten von 1,4 Milliarden Dollar wird die SNS ge-



Abb. 1 Die Spallationsneutronenquelle SNS am Oak Ridge National Laboratory, USA.

pulste Neutronenstrahlen zur Materialforschung produzieren, deren effektiv nutzbarer Neutronenfluss die besten bisherigen Quellen für viele Anwendungen um ein bis zwei Größenordnungen übertreffen wird. Die Neutronenerzeugung der SNS basiert auf einem größtenteils supraleitenden 1-GeV-Protonenbeschleuniger mit Speicherring, der mit einer Frequenz von 60 Hz ein Quecksilber-Target beschießt, um welches die Experimentierstationen sternförmig angeordnet sind. In vollem Betrieb werden jährlich ca. 2000 Forscher aus Wissenschaft und Industrie an den 24 Instrumenten der SNS experimentieren. Hauptanwendungsgebiete sind neben der Festkörperphysik auch Chemie, technische Materialien und Biologie.

Megawatt-Spallationsquellen erlauben neue methodische Ansätze, die die Fähigkeiten heutiger Neutronenquellen in vielen Wissenschaftsbereichen wesentlich übertreffen werden. Dies geschieht zu einem Zeit-

## KOMPAKT

- Die Spallationsneutronenquelle SNS erzeugt Neutronen durch den Beschuss eines flüssigen Quecksilber-Targets mit Protonen der Energie 1 GeV.
- Ihr Spitzenfluss an thermischen und kalten Neutronen wird bis zu zwei Größenordnungen höher sein als der von Forschungsreaktoren.
- Das Forschungszentrum Jülich baut an der SNS eines der vorgesehenen 24, zum Teil neuartigen Instrumente, ein Neutronenspinpolarisationspektrometer.

1) Das Wort Spallation stammt ursprünglich aus der Geologie.

Dr. Frank Klose, SNS Experimental Facilities Division; Dr. Norbert Holtkamp, SNS Accelerator Division (jetzt ITER Project), Oak Ridge National Laboratory, PO Box 2008, Oak Ridge, TN 37831, USA; Prof. Dr. Dieter Richter, IFF, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich

2) Thermische Neutronen haben Energien von 10 bis 100 meV.

punkt, wo Komplexität zu einem neuen Paradigma der Naturwissenschaften wird. In der Materialentwicklung geht es darum, die Prozesse auf immer kleineren Längen und Zeitskalen bis hinunter zu atomaren Dimensionen zu verstehen, wobei gleichzeitig die Wechselwirkungen auf verschiedenen Skalen bedeutsam sind. In der Informationstechnik werden Funktionsmaterialien inzwischen aus nanoskaligen Bauteilen aufgebaut. Strukturmaterialien für extreme Belastungen bestehen aus molekularen Schichten, Fasersystemen und Verbundkomplexen, Pharmazeutika werden auf der Basis des Verständnisses molekularer Vorgänge entworfen. Auch im medizinisch-biologischen Bereich gilt es, die komplexen Vorgänge innerhalb lebender Zellen mit molekularen Modellen zu erfassen. Selbstorganisationsprozesse, wie man sie in der Biologie überall findet, sollen biomimetische Verfahren ermöglichen und zu neuen und besseren Materialien und Abläufen führen. Gleichzeitig nehmen die Möglichkeiten von Computersimulationen, Trajektorien der Atome und Moleküle zu berechnen und daraus Eigenschaften vorherzusagen, dramatisch zu. Daher ist zu erwarten, dass sich künftig durch die komplementäre Anwendung von Neutronenmethoden und molekularen Simulationen besonders schnelle Fortschritte im Verständnis komplexer synthetischer und biologischer Materialien erzielen lassen.

In diesem Zusammenhang bedeutet die SNS einen entscheidenden Schritt nach vorn. Sie hebt die langjährige Begrenzung des Neutronenflusses auf und ermöglicht in vielen Wissenschaftsbereichen um Größenordnung empfindlichere Messverfahren. Die Funktion von biologischen Oberflächen und Grenzflächen, die Selbstorganisation synthetischer und biologischer weicher Materialien, die supramolekulare Chemie und die Rolle der Wasserstoffbindungen in Pharmazeutika, die molekulare Beobachtung realistischer Materialien in Echtzeit, die Beobachtung von Materialien unter

den Extrembedingungen der inneren Erde, insbesondere die Rolle des Wasserstoffs und des Wassers, sind nur einige Beispiele. Aber auch in der Technologie sind wichtige Fortschritte zu erwarten, wie die direkte Beobachtung katalytischer Prozesse, die Erforschung von nanostrukturierten magnetischen Clustern, von funktionalen Materialien wie die der Spintronik oder von Hochtemperatur-Supraleitern, von Materialien der Energietechnologie, von der Brennstoffzelle zur Petroleumwirtschaft, von Biosensoren, von Prozessen der Tribologie etc.

### Von Chadwick zur Spallation

James Chadwick gelang es 1932 erstmals, Neutronen durch den Beschuss von Beryllium mit Alpha-Partikeln zu erzeugen und ihre Existenz nachzuweisen. Seit-her hat die Leistungsfähigkeit von Neutronenquellen um viele Größenordnungen zugenommen (Abb. 2). Mit-hilfe von frühen, im kontinuierlichen Modus betriebenen Teilchenbeschleunigern wie etwa dem 37-inch-Zyklotron in Berkeley gelang es bereits in den dreißiger Jahren, über eine Million thermischer Neutronen<sup>2)</sup> pro Sekunde und Quadratzentimeter zu erzeugen. Eine ähnliche Quellenstärke erreichte Fermis erster Reaktor CP-1, an dem im Dezember 1942 in einer Racquetball-Halle auf dem Campus der University of Chicago die erste selbsterhaltende Kettenreaktion gelang. Schon ein Jahr später erzeugte der Graphit-Reaktor des im Rahmen des Manhattan-Projekts in Tennessee gegründeten X-10-Laboratoriums (heute Oak Ridge National Laboratory, ORNL) mehr als  $10^{12}$  Neutronen/cm<sup>2</sup>s. Die Neutronenforschung hat daher am ORNL eine lange Tradition, insbesondere wurde hier nach Kriegsende am Graphit-Reaktor erstmals Materialforschung mit Neutronenstreuung betrieben.

Nach der zunächst starken Steigerung der Quellenstärke setzte ab den sechziger Jahren eine Sättigung ein, da es technisch immer schwieriger wurde, bei steigender Leistung den Reaktorkern zu kühlen. Das Institut Laue-Langevin (ILL) in Grenoble sowie der High Flux Isotope Reactor (HFIR) am ORNL sind heutzutage, gemessen am Fluss thermischer Neutronen, die leistungsfähigsten Reaktoren.

Alternativ lassen sich Neutronen durch den Spallationsprozess erzeugen. Ein diesbezüglich kostenopti-mierter Beschleuniger arbeitet mit Protonenstrahlen bei etwa 1 GeV, die auf ein schweres Metall geschossen werden. Pro Proton werden hierbei etwa 20 bis 30 – meist sehr energiereiche – Neutronen frei. Für die Materialforschung ist es vorteilhaft, den Teilchenbe-schleuniger in einem gepulsten Modus zu betreiben. Die SNS-Quelle emittiert beispielsweise pro Sekunde 60 polychromatische Neutronenpulse, die ca. 1 µs lang sind. Indem man die Flugzeit zwischen Quelle und Detektor misst, lässt sich die für die Datenana-lyse wichtige Neutronenenergie bei typischen Ins-trumentlängen von 20 bis 80 Meter mit einer Genau-igkeit von einigen Zehntel Prozent messen. Gleiches

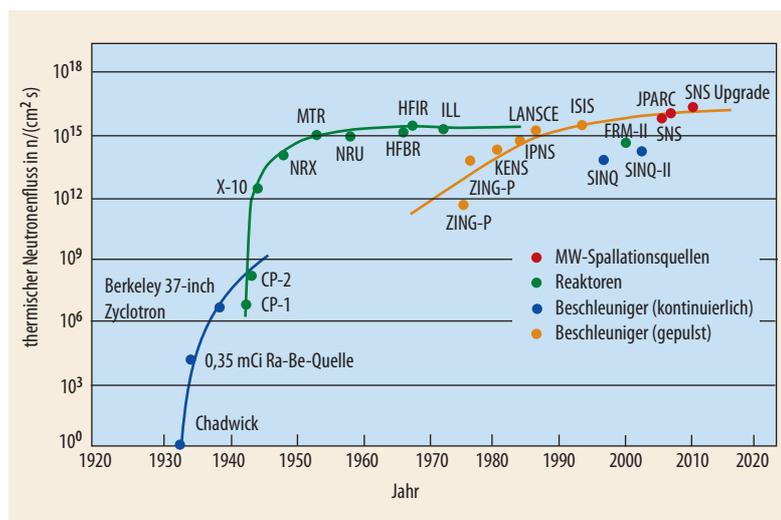


Abb. 2 Die Leistungsfähigkeit von Neutronenquellen hat in den vergangenen 70 Jahren über frühe Beschleuniger (blau), Reaktoren (grün) und Spallationsquellen (orange) um viele Größenord-

nungen zugenommen. Für gepulste Quellen wurde der Peak-Fluss statt des zeitgemittelten Flusses eingesetzt (siehe Text).



Abb. 3 Die Hauptkomponenten der SNS (siehe Text)

gilt für Energieänderungen, die bei inelastischer Streuung in Materialien auftreten. Daher ist im Vergleich zum Reaktor nicht der zeitgemittelte Fluss die entscheidende Größe, sondern der im kurzen Moment des Protonenbeschusses erzeugte Neutronenfluss („Peakfluss“). Die sehr schnellen Fortschritte in der Beschleuniger- und Targettechnologie haben es über die letzten Jahrzehnte ermöglicht, die Neutronenausbeute von gepulsten Spallationsquellen beträchtlich zu steigern. Die heute führende Anlage ISIS am britischen Rutherford Laboratory erzeugt mit einer Protonenstrahlleistung von 160 kW einen thermischen Peakfluss, der mit dem zeitgemittelten Fluss des ILL vergleichbar ist. Dadurch ergeben sich an diesen Anlagen in einigen Bereichen vergleichbare Möglichkeiten für Neutronenstreuexperimente.

Das U.S. Department of Energy (DOE) betreibt in den landeseigenen Laboratorien zahlreiche Großforschungsanlagen und hatte Anfang der 90er-Jahre beabsichtigt, einen 330-Megawatt-Forschungsreaktor, die Advanced Neutron Source (ANS), zu bauen. Angesichts der sehr hohen Kosten von 2,9 Milliarden US\$, der erwarteten politischen Komplikationen durch die Verwendung von hochangereichertem Uran als Brennstoff sowie einiger Skepsis hinsichtlich des potenziellen wissenschaftlichen Nutzens hat das DOE diese Pläne jedoch 1995 fallen gelassen. Die beträchtlichen Fortschritte in der Beschleunigertechnologie führten ein Jahr später zur Entscheidung, eine Spallationsneutronenquelle zu bauen, die durch einen Protonenstrahl mit ca. 1 Megawatt Leistung angetrieben wird. Da ein Institut allein ein Projekt dieser Größenordnung nicht schultern kann, wurde ein Konsortium von sechs National Laboratories (Lawrence Berkeley, Los Alamos, Thomas Jefferson, Brookhaven, Argonne und Oak Ridge) gegründet, welche jeweils für die einzelnen Hauptbestandteile der SNS zuständig waren. Rückblickend ist es dadurch gelungen, die technische Expertise der beteiligten Forschungseinrichtungen zu vereinen und eine äußerst breite politische Unterstützung für das SNS-Projekt zu gewährleisten, denn nun verteilen sich die Fördergelder auf insgesamt sechs US-Bundesstaaten.

## Beschleunigen und Speichern

Der Beschleunigerkomplex der SNS besteht im Wesentlichen aus einem 335 m langen Linearbeschleuniger (LINAC) und einem Speicherring (Abb. 3). Zunächst erzeugt die vom Lawrence Berkeley National Laboratory entwickelte Ionenquelle negativ geladene Wasserstoffionen, die mit Hilfe eines elektrischen Feldes in einen Radio-Frequenz-Quadrupol (RFQ) extrahiert werden. Der RFQ formt aus dem kontinuierlichen Ionenstrahl kleine Ladungspakete, die anschließend mit Hilfe

von normalleitenden RF-Resonatoren auf 186 MeV beschleunigt werden (der entsprechende Anlagenteil wurde vom Los Alamos National Laboratory errichtet). Die weitere Beschleunigung auf insgesamt 1,0 GeV übernimmt der am Thomas Jefferson Laboratory entwickelte supraleitende Teil des LINAC. In diesem Abschnitt werden in Klystrons erzeugte hochfrequente Radiowellen in Niob-Hohlraumresonatoren (Abb. 4) eingespeist. Dank der Supraleitung sind die Leistungsverluste in den Wänden der Resonatoren extrem gering (nur wenige Watt/m), sodass nahezu die gesamte Leistung der Ionenbeschleunigung zugute kommt. Der somit drastisch reduzierte Energieverbrauch hat natürlich auch erhebliche Einsparungen bei den Betriebskosten zur Folge. Der LINAC stellt somit 1 ms lange  $H^-$ -Pulse mit einer Frequenz von 60 Hz bereit. Innerhalb eines Pulses beträgt die gemittelte Stromstärke 26 mA.<sup>3)</sup>

Die Hauptaufgabe des Speicherrings besteht darin, den Protonenstrahl auf eine für die Neutronenflugzeitexperimente geeignete Pulsdauer von unter einer Mikrosekunde zu komprimieren. Hierzu wird jeder Protonenpuls in dem Speicherring „aufgewickelt“, ganz ähnlich wie man einen langen Draht auf einer

3) Eine ca. 160 Millionen \$ teure Erweiterung, um Energie und Strom zu erhöhen und die Gesamtleistung in etwa zu verdoppeln, wird derzeit bereits geplant.



Abb. 4 Im Linearbeschleuniger werden die Protonen mithilfe von Hohlraumresonatoren aus supraleitendem Niob beschleunigt.

Spule aufwickelt. Während einer Millisekunde legen die 1-GeV-Protonen ca. 260 km zurück, was – bei einem Umfang des Speicherrings von 248 m – 1060 „Windungen“ entspricht. Bei vollständiger Ringfüllung zirkulieren in ihm  $1,5 \times 10^{14}$  Protonen, sodass die gemittelte Stromstärke 25 Ampere beträgt. Da die Länge des „aufgewickelten“ Protonenpulses um rund einen Faktor 1000 reduziert wurde (von 260 km auf rund 250 m), dauert er auch nur noch weniger als eine Mikrosekunde. Ein starkes Magnetfeld koppelt den Protonenzug aus dem Ring aus und lenkt ihn in Richtung Target.

### Quecksilber als Target

Wie anfangs erwähnt, entstehen die Neutronen beim Beschuss eines Schwermetalltargets mit Protonen. Als Novum verwendet die SNS ein Flüssigtargt aus Quecksilber (Abb. 5). Dies hat gegenüber einem festen Target den Vorteil, dass keine strukturellen Strahlenschäden auftreten können und dass sich die Abwärme über einen Kühlkreislauf direkt durch das Quecksilber abführen lässt (ca. 60 % der Protonenstrahlleistung wird als Wärme im Target deponiert). Das Target ist auf einem Wagen befestigt, der aus dem Strahlzentrum herausgezogen werden kann. Wartungsarbeiten werden in einer hermetisch abgeschlossenen Halle („Hot Cells“) per Robotik durchgeführt. Insgesamt befinden sich im Target-Kühlkreislauf 18 Tonnen Quecksilber, die mit einer Geschwindigkeit von 20 l/s durch die Spitze fließen. Bei 1,4 MW Dauerbetrieb beschränken Strahlenschäden die Lebensdauer des Containers auf voraussichtlich vier Monate. Beim Austausch wird das Quecksilber abgelassen und später wiederverwendet. Obwohl feste Targetmaterialien wie Wolfram, angereichertes Uran oder Tantal, welche bei der britischen Spallationsquelle ISIS oder anderswo zurzeit eingesetzt werden, etwa ein Drittel höhere Neutronenausbeuten liefern, sind diese für den Megawatt-Betrieb weniger geeignet. Die bei dem Spallationsprozess entstehende nukleare Nachwärme

würde ein aufwändiges Targetkühlsystem erfordern, und außerdem wäre die Entsorgung mehrerer Targets pro Jahr sehr kostspielig.

Streuexperimente sind am aussagekräftigsten, wenn die Wellenlänge der Strahlung in etwa mit der Längenskala (Gitterkonstante) des zu untersuchenden Materials übereinstimmt. Die zunächst sehr energiereichen Spallationsneutronen (typische Energien von einigen MeV) müssen daher „abgekühlt“ werden. Zu diesem Zweck befinden sich in unmittelbarer Nähe des Targets „Moderatoren“, in denen die Neutronen durch inelastische Streuprozesse einen Großteil ihrer Energie verlieren. Als Materialien für eine möglichst effektive Moderation eignen sich besonders leichte Streuatome wie Wasserstoff. Bei der SNS dient ein Wasser-Moderator bei Zimmertemperatur dazu, thermische Neutronen mit Energien von 10 bis 100 meV (dies entspricht einem Wellenlängenbereich von ca. 1 – 3 Å) zu erzeugen. „Kalte“ Neutronen mit Energien zwischen 0,1 und 10 meV (Wellenlängen: 3 – 30 Å) entstehen in drei weiteren, mit flüssigem Wasserstoff gefüllten Moderatoren, die auf 20 K gekühlt werden. An Reaktoren haben Moderatoren typische Volumina von 20 Liter, wodurch sich eine Maxwell-Verteilung der Neutronengeschwindigkeiten einstellt. Im Gegensatz dazu sind die SNS-Moderatoren mit einem Liter deutlich kleiner, wodurch ein sog. untermoderiertes Spektrum mit einem großem Anteil von epithermischen (> 100 meV) Neutronen entsteht. Am wichtigsten ist allerdings, dass durch das kleinere Volumen die Neutronenemissionsdauer begrenzt wird und somit eine gute Zeitauflösung der Flugzeitmessungen bei den Neutronenstreuexperimenten gewährleistet bleibt. Die zeitliche Schärfe der Neutronenemission kontrollieren darüber hinaus neutronenabsorbierende Materialien, die innerhalb der Moderatoren oder um sie herum eingebaut sind. Die Neutronen verlassen letztlich die Moderatoren durch dünne Aluminiumfenster (10 cm breit, 12 cm hoch), auf die die Eingänge der Neutronenleiter ausgerichtet sind, welche die Neutronen zu den Instrumenten transportieren.

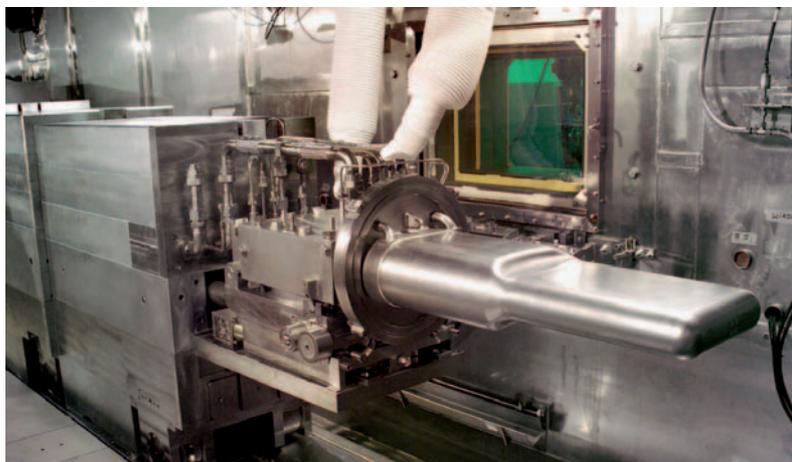


Abb. 5 Das SNS-Targetmodul in den Hot Cells mit dem Quecksilber-Container aus Edelstahl an der Spitze. Im eingebauten Zustand befinden sich die Moderatoren

direkt ober- bzw. unterhalb des schmalen Teils des Targets. Der Protonenstrahl trifft von rechts auf die Spitze des Quecksilber-Containers.

### Ein breites Feld von Anwendungen

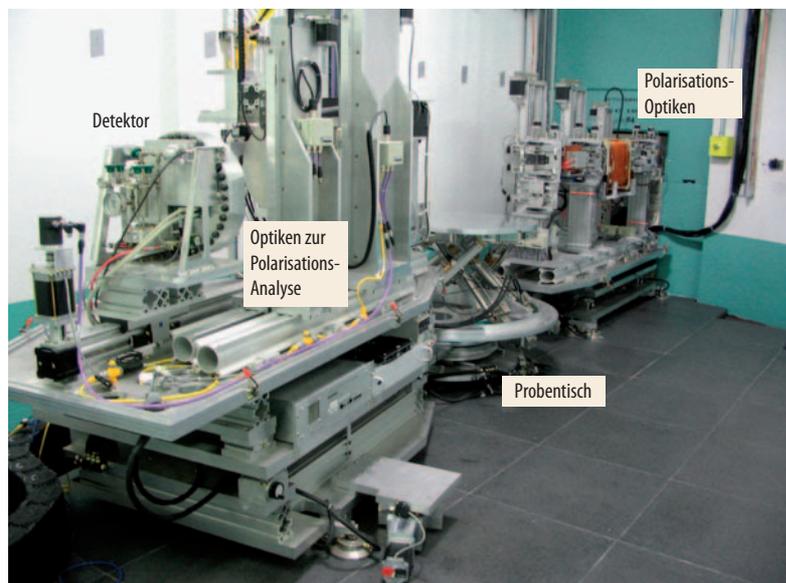
Verglichen mit der komplementären Synchrotron- oder Elektronenstreuung, ist die Brillianz von Neutronenstrahlen leider um viele Größenordnungen geringer. Dank eines Peakflusses, der gegenüber Reaktoren um den Faktor 20 bis 100 höher ist, sowie Neutronenstreuinstrumenten, die die neuesten Technologien von Neutronenleitern, Optiken und Detektoren benutzen, fällt dieser Nachteil bei der SNS zumindest etwas geringer aus. SNS-Instrumente werden im Vergleich zu den besten Instrumenten bei ISIS oder am ILL nicht nur höhere Datenraten aufweisen, sondern zusätzlich auch mit höherer Auflösung und Empfindlichkeit messen können. Ein besonderes Gewicht wird auch auf noch komplexere Probenumgebungen gelegt, unter anderem ist ein Hochfeldmagnet-Instrument

(Feld > 30 Tesla) in der Planungsphase. Insgesamt 24 Strahlausgänge stehen für Beamlines zur Verfügung, von denen Ende 2006 schon 17 fest an bestimmte Instrumente vergeben sind. Die SNS deckt mit ihrer Instrumentierung ein breites Feld von Anwendungen ab, das neben Festkörperphysik und Materialwissenschaft auch Chemie und Biologie sowie Grundlagenforschung in Kern- und Teilchenphysik umfasst.

Die Neutronenstreuinstrumente lassen sich in verschiedene Klassen einteilen, die jeweils eine oder mehrere Eigenschaften der Wechselwirkung des Neutrons mit der Materie ausnutzen, um bestimmte wissenschaftliche Fragestellungen zu beantworten. Neutronendiffraktometer etwa nutzen aus, dass der Streuwirkungsquerschnitt nicht wie bei der Röntgenstreuung proportional zur Elektronenzahl der zu untersuchenden Atomsorte ist, sondern aufgrund der Kernwechselwirkung von Element zu Element oft stark variiert. Damit lässt sich unter anderem die Position von leichten Atomen wie Wasserstoff oder Sauerstoff vor dem Hintergrund von schwereren Atomen genau bestimmen, was z. B. bei Mineralien, Hydraten, Zementen, Oxid-Materialien usw. wichtig ist. Sehr wichtig und entscheidend für die Proteinkristallographie ist auch die einzigartige Sensitivität des Neutrons für Wasserstoff. Da sich der Streuquerschnitt von Protonen und Deuteronen deutlich unterscheidet, bietet sich die Möglichkeit der Isotopensubstitution. In biologischen Materialien etwa, die oft mit der Methode der Neutronenkleinwinkelstreuung untersucht werden, kann man durch Kontrastvariation bestimmte Teile von großen Molekülgruppen hervorheben, wie z. B. Proteine, die von Zellmembranen umgeben sind. Solche Experimente sind relevant etwa im Hinblick auf die Entwicklung von neuartigen Medikamenten, die das Eindringen von Giftstoffen in menschliche Zellmembranen verhindern sollen. Die Neutronenreflektometrie erlaubt es, die Wechselwirkung zwischen Biomolekülen und Membranen mit submolekularer Auflösung zu untersuchen.

Neutronen haben ein magnetisches Dipolmoment und können daher mit Spin- und Bahnmomenten magnetischer Materialien wechselwirken. Magnetische Neutronenstreuung spielt eine besonders große Rolle bei hochkorrelierten Elektronensystemen wie Hochtemperatur-Supraleitern, bei denen sie entscheidend zum Verständnis des Zusammenhangs zwischen Supraleitung und Magnetismus beiträgt. Verschiedene Instrumentklassen, wie Diffraktometer, Kleinwinkelstreugeräte und Reflektometer (Abb. 6), erlauben es, magnetische Strukturen auf sehr unterschiedlichen Längenskalen zu untersuchen – angefangen von ferro- und antiferromagnetischer Ordnung auf atomarer Skala bis hin zu mesoskopischen Strukturen im Mikrometerbereich. Beispiele sind Spiralstrukturen in Selten-Erd-Magneten, magnetische Flussgitter in Supraleitern oder Domänen in nanoskaligen magnetischen Schichten.

Mit thermischen und kalten Neutronen lassen sich atomare oder magnetische Anregungen in Festkörpern über einen weiten Energiebereich ( $1 - 10^{-7}$  eV) und



zeitliche Korrelationen im Bereich von  $10^{-14} - 10^{-7}$  s bestimmen. Für inelastische Streuexperimente an Spallationsquellen sind Chopper-Spektrometer ausgesprochen gut geeignet. Bei ihnen erzeugt man mit Hilfe eines hochfrequenten Fermi-Choppers monochromatische Neutronenpulse, mit denen man die Probe beschießt. Durch Flugzeitmessungen zwischen Probe und Detektor lassen sich dann die charakteristischen Anregungsenergien bestimmen. Bemerkenswert ist, dass sich bei diesen Spektrometern durch Benutzung großflächiger Detektoren sehr effektiv große Bereiche im Parameterraum des Energie/Impulsübertrags ausmessen lassen. Bei SNS sind bislang vier Spektrometer dieses Typs im Bau, die sich, jeweils spezialisiert auf bestimmte Anwendungen, in ihrem charakteristischen Energiebereich und in der Energieauflösung unterscheiden. Eine andere Gruppe von Instrumenten benutzt eine „inverse Geometrie“ zur Energiebestimmung. Hier wird die Flugzeitmethode auf der Primärseite des Spektrometers verwendet und eine Energieanalyse der Neutronen nach der Streuung an der Probe mit Hilfe von Kristall-Monochromatoren durchgeführt. Das nach letzterer Methode arbeitende SNS-RückstreuSpektrometer, welches auf die Untersuchung von Diffusions- oder Vibrationsmoden von Molekülen bei hoher Energieauflösung (bis  $2 \mu\text{eV}$ ) spezialisiert ist, ist bereits seit Mai 2006 in Betrieb. Ein weiteres Spektrometer dieses Typs ist im Bau und wird sich auf Spektroskopie an Chemie-Materialien aus den Bereichen Polymere, Geologie, Biochemie, Katalyse usw. spezialisieren.

Abb. 6 Das Magnetismus-Reflektometer wurde als eines der ersten Instrumente an der SNS in Betrieb genommen.

### Der deutsche Beitrag zur SNS

Das Forschungszentrum Jülich (FZJ) baut, finanziert durch das BMBF, an der SNS ein neuartiges hochauflösendes Neutronenspinechospektrometer (NSE), das zur Erstinstrumentierung der SNS gehört (Abb. 7). Damit stellt Deutschland eines von derzeit 17 geplanten und genehmigten Instrumenten. Die herausragende

Eigenschaft dieses Instruments für die SNS ist seine sehr hohe Energieauflösung ( $< 1$  neV), die alle bestehenden Instrumente um fast eine Größenordnung übertrifft. Damit wird es erstmals möglich, einen Energiebereich für die Neutronenstreuung zu erschließen, der bislang nur der Lichtstreuung zugänglich war. Ein Spinechospektrometer bestimmt den beim Streuprozess zwischen Neutron und Probe auftretenden Energieübertrag durch Vergleich der Larmor-Präzession der Neutronen vor und nach der Wechselwirkung mit der Probe. Die erreichbare Energieauflösung hängt ganz wesentlich von dem Produkt aus Feldstärke und Länge der magnetischen Spulen (dem „Feldintegral“) sowie von deren Qualität ab. Im Jülicher Gerät kommen voll kompensierte supraleitende Magnete zum Einsatz, welche die Auflösung steigern. Als zweites wesentliches Element wurden neuartige Korrektur-elemente entwickelt, die eine Korrektur auf homogene, vom detaillierten Neutronenweg unabhängige Feldintegrale erlauben. Beide Elemente sind der Schlüssel zum Erreichen der höchsten Energieauflösung der Neutronenstreuung. Eine Kooperation zwischen dem FZJ, dem Hahn-Meitner-Institut und dem ILL hat bereits Methoden zur Nutzung eines breiten einfallenden Wellenlängenspektrums an einer Spallationsquelle entwickelt und ihre Nutzbarkeit nachgewiesen. Eine komplette magnetische Berechnung sowie eine Monte-Carlo-Simulation des Flusses zeigen die hohe Leistungsfähigkeit des Jülicher Instruments. An seiner Position an dem gekoppelten kalten  $H_2$ -Moderator der Beamline 15 wird das Gerät ein Wellenlängenband von  $2 \text{ \AA} < \lambda < 20 \text{ \AA}$  nutzen können und damit einen beispiellosen dynamischen Bereich von ca. sechs Dekaden in der Energieauflösung ermöglichen. Da NSE-Instrumente sehr empfindlich auf äußere Magnetfelder reagieren, entsteht weltweit erstmals eine magnetische Abschirmkammer um das Instrument herum.

Nach seiner Fertigstellung Anfang 2009 wird das Gerät der Erforschung der langsamen mesoskopischen Dynamik dienen. Dazu zählen z. B. die hierarchische

Relaxation in Schmelzen von verzweigten Polymeren (zielt auf ein molekulares Verständnis rheologischer Eigenschaften), die Dynamik komplexer Flüssigkeiten, von Mikroemulsionen, Gelen, Polyelektrolyten und die Dynamik spezieller molekularer Strukturen im Bereich der Biophysik, wie die Domänenbewegung in Proteinen, sowie im Bereich der Glasbildung und des Glasübergangs. Weitere Schwerpunkte werden sich bei nanostrukturierten Materialien ergeben, wie z. B. der Suspension von Nanopartikeln, von Magneto-flüssigkeiten oder elektrorheologischen Flüssigkeiten, Transportphänomenen in porösen Medien etc. Dieses Instrument wird die neuesten Technologien im Bereich der Instrumentierung der Neutronenstreuung in sich vereinen und mit der weltweit höchsten Energieauflösung eine Führungsrolle im Bereich der hochauflösenden dynamischen Neutronenstreuung übernehmen.

### Neutronenforschung mit Zukunft

Die Spallation Neutron Source produziert seit April 2006 erste Neutronen für die Materialforschung. Die Leistung des Protonenstrahls wird nun langsam hochgefahren und hat Mitte November 2006 bereits 60 kW erreicht. Damit übertreffen die ersten drei in Betrieb genommenen SNS-Instrumente (das Rückstreu-Spektrometer, das Magnetismus-Reflektometer sowie das Flüssigkeits-Reflektometer) in ihrer Leistungsfähigkeit bereits die entsprechenden Geräte an kleineren gepulsten Quellen wie Argonnes IPNS. Erste Kalibrierungsmessungen zeigen, dass die zum Teil neuartigen Strahloptiken der Instrumente wie berechnet funktionieren und dass die theoretischen Neutronenflüsse größtenteils erreicht werden. Im Sommer 2007 soll die Leistung erstmals 100 kW überschreiten, 1 MW soll voraussichtlich Ende 2008 erreicht werden. Um auch in der nächsten Dekade die führende Einrichtung für Materialforschung mit Neutronen zu bleiben, hat das DOE Office of Science bereits erste Finanzmittel für eine signifikante Erhöhung der Beschleunigerleistung auf über 3 MW bereitgestellt. Bei der Auslegung der SNS ist von Anfang an eine zweite Targetstation mit eingeplant worden, mit deren Fertigstellung Mitte des nächsten Jahrzehnts zu rechnen ist. Diese wird speziell zur Produktion von langwelligen Neutronen ausgelegt, die besonders für Anwendungen in Weicher Materie und Biologie wichtig sind. Dadurch wird sich die Anzahl der Instrumente auf knapp fünfzig verdoppeln. Zusammen mit dem kürzlich fertiggestellten Center for Nanophase Materials Sciences und der ebenfalls kürzlich neu gebauten Neutronenleiterhalle am HFIR-Reaktor wird sich Oak Ridge unzweifelhaft zu einem der weltweit bedeutendsten Zentren für Materialforschung entwickeln.

Künftig werden die meisten Neutronennutzer wissenschaftliche Experten in ihren speziellen wissenschaftlichen Feldern sein, ohne besondere Neutronenexpertise zu besitzen. Um das Potenzial der SNS

4) [www.neutrons.cclrc.ac.uk](http://www.neutrons.cclrc.ac.uk)

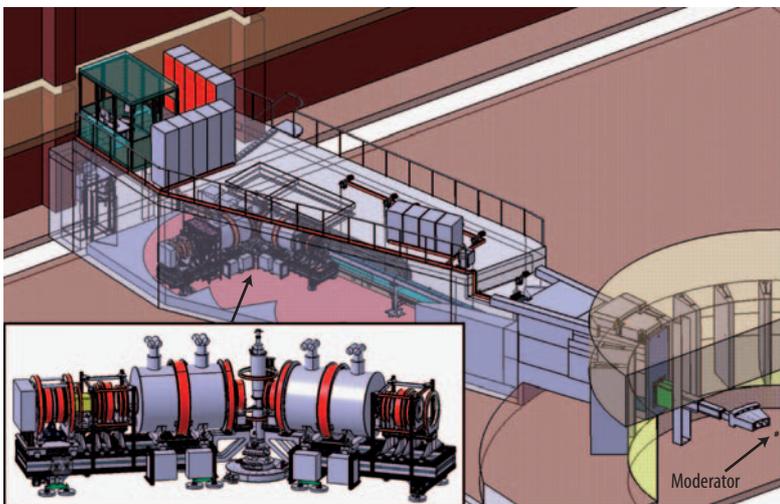


Abb. 7 Modell der Neutronenspinecho-Beamline, die das Forschungszentrum Jülich an der SNS baut und ab 2009

betreiben wird. Der Einschub zeigt das eigentliche Spektrometer mit den supraleitenden Spulenpaaren.

dennoch voll zu nutzen, wird die SNS daher über eine reine Nutzereinrichtung hinausgehen und eine breite wissenschaftliche Infrastruktur errichten, zu der z. B. das Joint Institute for Biology Sciences, das Joint Institute for Computational Science, das Center for Nanophase Materials Sciences, das Joint Institute for Neutron Science etc. gehören. Derartige wissenschaftliche Zentren, die mit einer Neutronenquelle verknüpft sind, wirken als Katalysator für deren Nutzung und werden den Neutronen neue Wissenschaftsfelder erschließen.

Zugleich gilt die SNS als Wegbereiter für ähnliche gepulste Megawatt-Neutronenquellen in Japan (derzeit im Bau) und in Europa (geplant). Ursprünglich hatten deutsche und dann auch europäische Bemühungen um eine Megawatt-Spallationsquelle, die European Spallation Source (ESS), sogar eine Pionierrolle für die Entwicklungen zur SNS gespielt. Allerdings sind diese Bemühungen zuletzt 2002/2003 gescheitert, als sich der Wissenschaftsrat gegen eine deutsche Förderung der ESS ausgesprochen hat. Heute, im Jahr 2007, bemühen sich verschiedene europäische Standorte um eine Realisierung einer modifizierten ESS, die vermutlich zunächst aus einer Langpulsquelle hoher Intensität bestehen wird. Dazu zählen nach einer Empfehlung des britischen „Neutron Review“<sup>(4)</sup> Großbritannien sowie Schweden – mit einer starken skandinavischen Initiative, die ESS nach Lund zu bringen – und Spanien mit einem Vorschlag für Bilbao. Kürzlich haben der französische Präsident Chirac und der spanische Ministerpräsident Zapatero in einer offiziellen Stellungnahme die hohe Priorität einer europäischen Spallationsquelle hervorgehoben und den Standort Bilbao bekräftigt.

#### DIE AUTOREN

**Frank Klose** arbeitet seit 1999 am Oak Ridge National Lab, wo er als Senior Scientist für Entwicklung und Betrieb von Neutronenstreuinstrumenten an der SNS zuständig ist. Er hat in Göttingen studiert und promoviert, bevor er als Postdoc zunächst an das Hahn-Meitner-Institut Berlin sowie das Argonne National Lab ging.



**Norbert Holtkamp** hat in Berlin Physik studiert und in Darmstadt promoviert. Nach Postdoc-Aufenthalten in Berlin und Stanford arbeitete er am DESY in Hamburg sowie am Fermilab, bevor er 2001 als Direktor der Beschleunigerabteilung zur SNS wechselte. Im April 2006 wurde er zum stellvertretenden Direktor des Fusionsreaktors ITER ernannt.



**Dieter Richter** ist seit 1989 Direktor am Institut für Festkörperforschung des FZ Jülich sowie Professor an der Uni Münster. In zahlreichen Gremien und Komitees, u. a. am ILL in Grenoble sowie am FRM-2 in Garching, setzt er sich für die Forschung mit Neutronen ein. Nach dem Physikstudium in Braunschweig promovierte und habilitierte er an der RWTH Aachen.

