

Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

Ergebnisbericht
Forschung & Entwicklung 2000

Bildbeschreibungen Deckblatt

Abb. 1	2
3	4

- Abb. 1:** Spindichteverteilung in der organischen Verbindung 4,5-dimethyl-1,2,4-triazol-nitronyl-nitroxid, gemessen am ILL (D3)
(R. Feyerherm, A. Loose, Abt. SF2, E. Ressouche (CEA Grenoble), E. Lelievre-Berna (ILL Grenoble) und J. P. Sutter (ICMCB Bordeaux))
- Abb. 2:** TEM-Aufnahme von kleinen Ruthenium-Katalysatorpartikeln, geträgert auf Ruß-Partikeln, für die Sauerstoffreduktion in Brennstoffzellen
(M. Hilgendorff, U. Bloeck, M. Giersig, Abt. SE5)
- Abb. 3:** gerechnetes Dosisprofil mit CT-basierter Planung der Protonenstrahlung
(C. Rethfeldt, J. Heese, H. Kluge, Abt. SF4)
- Abb. 4:** SEM-Aufnahme von ZnO, abgeschieden mit MOMBE auf Si (111) 7x7
(U. Meier, I. Sieber, C. Pettenkofer, Abt. SE6)

Ergebnisbericht
Forschung & Entwicklung 2000

Hahn-Meitner Institut Berlin GmbH
Glienicke Str. 100
D-14109 Berlin (Wannsee)

Koordinierung:
Maren Achilles
Telefon: (030) 8062 2668
Telefax: (030) 8082 2047
e-mail: achilles@hmi.de

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	5
Einführung	6
SF STRUKTURFORSCHUNG	7
Großgeräte / Nutzerbetrieb	9
BENSC	11
NAA-Labor und Bestrahlungsdienst am BER II	15
ISL-Ionenstrahllabor Berlin	16
SF1 Methoden und Instrumente	19
BENSC – Aktivitäten	21
BENSC-Instrumentbetreuung	21
Entwicklung neuer Methoden der Neutronenstreuung	21
Spallation	23
Softwareentwicklung von neuen Instrumentierungsansätzen, "Flugsimulator" für virtuelle Instrumente	23
Entwicklung von Instrument-Prototypen für zukünftige Neutronenquellen	24
Untersuchungen zur Targetstation einer Spallationsquelle	25
Kollektive Dynamik und Diffusion	26
Kollektive Dynamik in Materialien komplexer Struktur	26
Diffusion und Materialtransport in kondensierter Materie	28
Überstrukturen und konkurrierende Wechselwirkungen	30
SF2 Magnetismus	31
Volumenmagnetismus	33
Magnetische Modellsysteme und molekularer Magnetismus	33
Magnetismus von Kernspinsystemen	34
Magnetismus dünner Schichten	35
Neue magnetische Systeme: Übergangsmetallionen in Festkörpern und dünnen Schichtsystemen	35
Dünne magnetische Schichten und Nanostrukturen	36
Synchrotronexperimente an magnetischen Schichten	37
BENSC Aktivitäten	39
BENSC-Instrumentbetreuung	39
³ He-Polarisationsfilter	39
BESSY Aktivitäten	40
Bau eines Undulators bei BESSY	40
Bau der PGM-Beamline am Undulator mit Meßplätzen für magnetische Nanostrukturen	41
Bau eines Meßplatzes am 7T-Wiggler für magnetische Untersuchungen	42
SF3 Werkstoffe	43
Mikrostruktur und Kinetik der Phasenumwandlungen in ausgewählten Legierungen und keramischen Materialien	45
Eigenspannungen in Werkstoffen und Bauteilen	48
BENSC Aktivitäten	50
SF4 Struktur und Dynamik	51
Atomare Dynamik, lokale Strukturen	53
Atomare Dynamik: Ionenimpakt	53
Atomare Dynamik: Diffusion und Phasenumwandlung	54
Atomistik der Bildung und Umwandlung lokaler Strukturen	55

Ionenstrahlanalytik	57
Augentumortherapie	59
Technologie mit Ionenstrahlen	60
ISL - Beschleunigerentwicklung und -betrieb	61
Entwicklung	61
SF5 Theoretische Physik	63
Magnetische Systeme, Thermodynamik und atomare Stöße	65
Magnetische Systeme reduzierter Dimension	65
Mikrokanonische Thermodynamik	66
Atomare Stöße	66
Halbleiterphysik und Photovoltaik	67
SF6 Spurenelemente	69
Analyse von Spurenelementen und Metalloproteinen durch NAA und andere Methoden	71
Molekulare Spurenelementforschung: Seleno- und Metalloproteine	72
Klinische Anwendung und epidemiologische Studien	74
SF7 Nukleare Messtechnik	77
ERDA und Kernspektroskopie	79
ERDA-Messungen und Wechselwirkung von Ionen mit Materie	79
Kernspektroskopie	80
Entwicklung eines ortsabbildenden Detektors für Reaktorneutronen	83
RE Forschungsreaktor	85
BEREICH SOLARENERGIEFORSCHUNG	89
SE1 Silizium-Photovoltaik	91
Silizium Photovoltaik	93
Dünnschichtsolarzellen aus kristallinem Silizium	93
Grenzflächen und Passivierung	95
Silizium-Heterostrukturen	96
SE2 Heterogene Materialsysteme	99
Chalkopyrit Solarzellen	101
CSVV – Closed-Spaced Vapour Transport	101
MOCVD - Metallorganic Chemical Vapour Phase Deposition	102
Chalkopyrit Solarzellen	103
Neue Materialien	104
Eta-Zelle	106
Pufferschichten, alternative Dünnschichttechnologie	106
Ionenstrahlanwendungen	108
Fullerene	109
SE3 Technologie	111
Technologie	113
Chalkopyrit-Solarzellen: Entwicklung sequentieller Prozesse auf Grundlage des CIS-Materialsystems	113
Chalkopyrit-Solarzellen: In-situ-Prozesskontrolle und Dotierung	113
Strahlungsbelastbarkeit von Dünnschicht-Solarzellen	114
SE4 Dynamik von Grenzflächenreaktionen	117
Injektionsolarzellen	119
Präparation von mesoskopisch strukturierten Oxidschichten	119
Präparation und Charakterisierung von III-V-Halbleitern und deren Grenzflächen in der Gasphase	119
Dynamik und Energetik von Licht-induziertem Ladungstransfer	121
Funktion und Charakterisierung von Injektionszellen	122
Elektronenmikroskopie von Solarzellen	122
Nasschemische Präparation von Heterokontakten	122

SE5	Solare Energetik	123
	Solare Energetik	125
	Charakterisierung und Optimierung von neuen Materialien und Heterostrukturen	125
	Photoelektrochemische und (photo)elektrokatalytische Prozesse	127
	Neue Energiesysteme	128
	Grenzflächenengineering	129
SE6	Elektronische Struktur von Halbleitergrenzflächen	131
	Halbleitergrenzflächen	133
HAD	Informationstechnik	135
	Informationstechnik	137
	Multimedia-Arbeitsplatz	137
	Elektronisches Laborbuch	137
	Glasfaserdosimeter für TTF	138
Anhang		141

Vorwort des wissenschaftlichen Geschäftsführers

Das Jahr 2000 war ein erfolgreiches und in vieler Hinsicht bewegtes Jahr für das Hahn-Meitner-Institut. Es begann mit der Neustrukturierung der wissenschaftlichen Bereiche, durch die die programmatischen Ziele und Verantwortlichkeiten gestärkt werden sollen insbesondere auch im Hinblick auf die anstehende Programmorientierte Förderung der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft. Seit dem 1.1.2000 sind die wissenschaftlichen Abteilungen zu zwei Bereichen zusammengefasst worden, die den bisherigen Forschungsschwerpunkten entsprechen. Innerhalb der Bereiche definieren sich die Abteilungen durch ihr programmatisches Profil.

Im Bereich Strukturforschung sind die Abteilungen und ihre Aufgaben auch deshalb deutlich verändert worden, da die Nutzung der Synchrotronstrahlung in das Programm aufgenommen wurde. Weitere Impulse für die Profilierung unserer Strukturforschung erwarten wir im Jahr 2001 durch die anstehenden Neuberufungen: das Berufungsverfahren "Festkörper-/Vielteilchentheorie" konnte bereits abgeschlossen werden; Herr Prof. Dr. Erwin Frey wird zum 1. Juni 2001 seine Tätigkeit am HMI und der Freien Universität Berlin aufnehmen. Im Verfahren „Werkstoffwissenschaften“ ist der Ruf an den Erstplazierten ergangen, so dass auch hier mit einer Nachbesetzung noch im Jahr 2001 gerechnet werden kann. Das dritte Verfahren zur Nachbesetzung des Abteilungsleiters „Magnetismus“ befindet sich auf gutem Wege.

Im Bereich Solarenergieforschung konnte das in den letzten Jahren entwickelte Forschungsprogramm weiter konsolidiert werden. Im Hinblick auf die anstehende Begutachtung des Bereichs im Jahr 2002 und der Tatsache, dass in den nächsten Jahren mehrere leitende Wissenschaftler ausscheiden, sind intensive Diskussionen zur Entwicklung eines Langfriststrategie-Konzeptes der Solarenergieforschung am HMI begonnen worden.

Ein bereits unübersehbares und immer noch wachsendes Gewicht hat die Zusammenarbeit mit BESSY. Diese ist im Jahr 2000 durch den gemeinsamen Aufbau von Insertion Devices und Messinstrumenten voll angelaufen. Dabei wird das Programm der Strukturforschung die bisherige Nutzung des BESSY Rings erweitern.

Die Entwicklung eines gemeinsamen Konzeptes zur Verzahnung der Nutzung der Berliner Großgeräte ist für HMI und BESSY eine der wichtigen Aufgaben der nächsten Jahre.

Auch der Bereich Solarenergie verstärkt seine Aktivitäten auf dem BESSY-Gebiet der Spektroskopie und elektronischen Struktur. Hier konnten im Berichtsjahr für den Aufbau einer „Synchrotron-Diagnostik zur Unterstützung der Material- und Technologie-Entwicklung von kostengünstigen $\text{Cu}(\text{In,Ga})(\text{S,Se})_2$ -Photovoltaik-Modulen“ erfolgreich

Projektgelder beim Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) eingeworben werden. Auch über den Vernetzungsfonds des Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) ist es dem Bereich gelungen, viele neue und interessante Projekte auf den Weg zu bringen.

Für die langfristige Zukunft des HMI nicht weniger bedeutend ist die Beteiligung an der Entwicklung neuer Großgeräte für die Forschung in Europa.

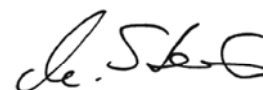
Das Institut hat sich auch im Berichtsjahr zusammen mit dem FZ Jülich intensiv den F&E-Arbeiten gewidmet, mit denen das Projekt "Europäische Spallationsneutronenquelle" (ESS) zur Entscheidungsreife gebracht werden soll. Darüber hinaus hat das HMI als „leitendes Laboratorium“ die Koordination einer breiten internationalen Zusammenarbeit zur Entwicklung von Spallationsquellen sowie daran angepasster Instrumentierungskonzepte übernommen.

Auch am TESLA Projekt bei DESY hat sich das HMI, allerdings vorerst nur in kleinem Umfang, beteiligt. Damit ist das HMI in die Planung und Entwicklung von zwei der wichtigsten zukunftsweisenden Großgeräte für die europäische Forschung eingebunden.

Neben der wissenschaftlichen Arbeit und ihrer erfolgreichen Präsentation in zahlreichen Veröffentlichungen und Konferenzbeiträgen sind auch die Anstrengungen, für Verständnis und Interesse an der Wissenschaft in einer breiteren Öffentlichkeit zu werben, weiter verstärkt worden, insbesondere die Bemühungen um potenziellen wissenschaftlichen Nachwuchs und die Schülerschaft. Neben einem im Berichtsjahr erstmalig durchgeführten Mädchen Technik Tag und den Wissenschaftsprojekttagen für Schüler sei insbesondere die Ausstellung „Lebendige Wissenschaft“ im Rahmen der HGF-Jahrestagung 2000 in München erwähnt. Hier stießen auch die Exponate des HMI auf eine ganz außerordentliche Resonanz bei den jugendlichen Besuchern.

Dies alles trägt zur Stärkung der Anerkennung bei, die das HMI national und international erfährt. Diese positive Entwicklung hätte ohne das große Engagement unserer Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter nicht erreicht werden können. Dafür möchte die Geschäftsführung an dieser Stelle herzlich danken.

Berlin, Mai 2001



Prof. Dr. Michael Steiner

Einführung

Mit dieser Broschüre berichtet das Hahn-Meitner-Institut über die Ergebnisse seiner Forschung und Entwicklung im Jahre 2000.

Zum 1. Januar 2000 ist am Hahn-Meitner-Institut der Übergang in eine neue Organisationsstruktur der wissenschaftlichen Bereiche und Abteilungen vollzogen worden. Die Überführung der bisherigen fünf in nur noch zwei wissenschaftliche Bereiche gibt auch die neue Berichtsstruktur vor. Entsprechend dem Bereich Strukturforschung mit seinen sechs Abteilungen und einer Arbeitsgruppe und dem Bereich Solarenergieforschung mit seinen fünf Abteilungen und einer Arbeitsgruppe werden die Ergebnisse in Forschung und Entwicklung 2000 detailliert dargestellt.

Der Abschnitt Strukturforschung enthält zudem eine zusammenfassende Darstellung des Nutzerbetriebs des HMI. Neben den eigenen Forschungsarbeiten ist es eine wesentliche Aufgabe des Hahn-Meitner-Instituts, die hier betriebenen Großgeräte, Forschungsreaktor und Beschleuniger, für die Nutzung durch Wissenschaftler der Universitäten und anderer Forschungseinrichtungen im In- und Ausland zur Verfügung zu halten, und den externen Nutzern eine optimale Betreuung zu gewährleisten.

Angaben u.a. zu Publikationen, Konferenzbeiträgen, Kooperationen und Gästen sowie die von Mitarbeitern des Hauses an den umliegenden Universitäten durchgeführten Lehrveranstaltungen und die fertiggestellten Examensarbeiten werden in einem separaten Anhang ausgewiesen, der bei der Presse- und Öffentlichkeitsarbeit des HMI auf Anforderung bereit gehalten wird. Darüber hinaus ist er auch als Download-Version im Internet unter (<http://www.hmi.de/pr/druckschriften.html>) verfügbar.

Als separate wissenschaftliche Jahresberichte werden außerdem vorgelegt

Scientific Report 1999 – 2000 Theoretical Physics	HMI-B 573
Statusbericht Strukturforschung 1997 – 2000	HMI-B 575
BENSC Experimental Reports 2000	HMI-B 576

Diese können bei den entsprechenden Bereichen oder über die Geschäftsführung des HMI angefordert werden.

Bereich

SF Strukturforschung

Den Bereich Strukturforschung bilden die wissenschaftlichen Abteilungen, deren Arbeit primär durch die Nutzung der Großgeräte BER II / BENSC und ISL, in Zukunft auch BESSY bestimmt ist.

Er widmet sich in erster Linie der Erforschung mikroskopischer Struktur und Dynamik in kondensierter Materie. Darüber hinaus werden die Großgeräte des HMI auch für spezifische Anwendungen auf den Gebieten Medizin, Gesundheit und Umweltschutz (Augentumorthherapie mit Protonenstrahlen, Aktivierungsanalyse mit Neutronenstrahlen) eingesetzt.

Das wissenschaftliche Programm umfaßt drei einander ergänzende Aufgaben: die Bereitstellung von erstklassigen Forschungsmöglichkeiten an den vorhandenen Instrumenten für eine breite nationale und internationale Nutzergemeinde im Rahmen von BENSC und ISL, - später auch bei BESSY II -, die Entwicklung neuer Methoden und Instrumente, und eigene Forschung mit den vom HMI aufgebauten und entwickelten Instrumenten und Methoden.

Dazu gehören eine große Anzahl von Anlagen zur Probencharakterisierung wie z. Bsp. Elektronenmikroskopie, Feldionenmikroskopie, Röntgenbeugung und hochauflösende Meßeinrichtungen, sowie die Realisierung extremer Probenumgebungen (Tiefe Temperaturen bis in den mK-Bereich, Magnetfelder bis 15 Tesla).

Neben der eigentlichen Strukturforschung umfasst die Arbeit des Bereichs auch die spezifische Nutzung der Großgeräte des HMI für Forschung im Dienste der Gesundheit (Hochenergetische Protonen für Augentumorthherapie mit Protonenstrahlen, Neutronenaktivierungsanalyse für Spurenelementforschung u. a.).

Der Bereich gliedert sich in 6 wissenschaftliche Abteilungen

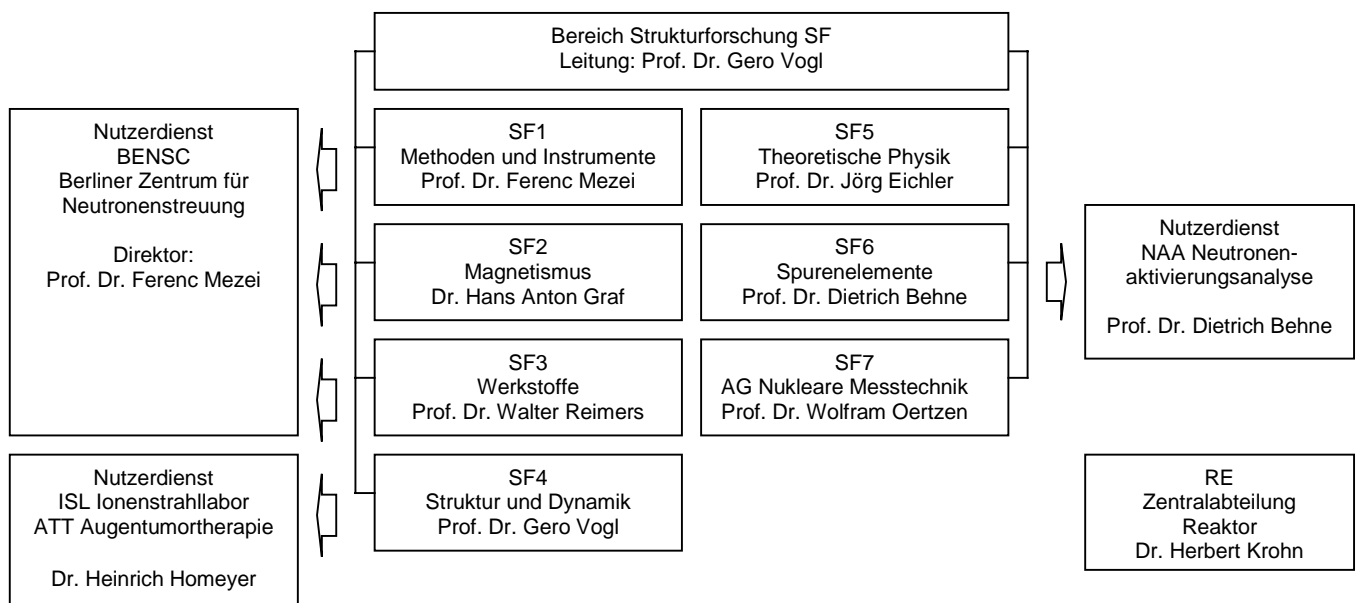
- SF1 Methoden und Instrumente**
- SF2 Magnetismus**
- SF3 Werkstoffe**
- SF4 Struktur und Dynamik**
- SF5 Theoretische Physik**
- SF6 Spurenelemente**

und die Arbeitsgruppe

- SF7 Nukleare Messtechnik.**

Die ersten drei Abteilungen tragen das Berliner Zentrum für Neutronenstreuung, **BENSC**, die vierte ist verantwortlich für Betrieb und Entwicklung des **IonenstrahlLABORS** sowie die **Augentumorthherapie** und die Abteilung SF6 stellt im Nutzerdienst die **Neutronenaktivierungsanalyse** zur Verfügung.

Die Zentralabteilung **Reaktor** ist zwar organisatorisch nicht dem Bereich Strukturforschung, wird aber, da sie zu 100% dem Bereich zuarbeitet, hier als Teil der Strukturforschung dargestellt.



**Großgeräte /
Nutzerbetrieb**

BENSC

Direktor: Prof. Dr. Ferenc Mezei

Das *Berliner Zentrum für Neutronenstreuung (BENSC)* entwickelt und betreibt die wissenschaftlichen Instrumente am Forschungsreaktor BER II und stellt rund 70 % der Messzeit an den Hauptgeräten Gastgruppen aus dem In- und Ausland zur Verfügung.

Auf regionaler und nationaler Ebene erfüllt BENSC damit Großforschungs-spezifische Gemeinschaftsaufgaben der

- Unterstützung deutscher Universitäten und hochschulfreier Forschungsinstitute,
 - in Hinblick auf ein breites Feld von Aufgaben von der Ausbildung bis hin zu herausragenden Projekten der Spitzenforschung. Eng damit verbunden ist die Aufgabe der
 - Unterstützung industrieller Partner,
- die - überwiegend in Kooperationsprojekten - dabei in ähnlicher Weise von den einzigartigen messtechnischen Möglichkeiten von BENSC und dem hochspezialisiertem Know-how der Mitarbeiter profitieren wie die Forschungsinstitute.

Über den nationalen Rahmen hinausgehend hat BENSC sich auch eine starke Rolle im Reigen der Neutronenquellen als *Europäisches Forschungszentrum* errungen. Die weiterhin zunehmende internationale Ausrichtung wird dadurch unterstrichen, dass der Anteil der ausländischen Gastforscher inzwischen den der Gäste aus Deutschland übersteigt. Die international orientierte Nutzung von BENSC erhielt starke Impulse durch erhebliche und steigende jährliche finanzielle Zuwendungen durch die Europäische Kommission.

BENSC wird getragen von den Abteilungen SF1 und SF2, die jeweils rund 70 % der Arbeit ihrer planmäßigen wissenschaftlichen Mitarbeiter und die gesamte Kapazität der technischen Mitarbeiter einbringen, sowie von der Abteilung SF3, aus der etwa 20 % der Arbeit der planmäßigen wissenschaftlichen Mitarbeiter für BENSC erbracht wird. Entsprechend ist der Überlapp bei den Aufgaben, insbesondere bei instrumentellen Entwicklungen, sehr groß.

Die Serviceorientierung der Aufgaben bei BENSC erfordern - in höherem Maße als etwa in Gruppen der reinen Forschung - eine zuverlässige Bewahrung, Bereitstellung und Nutzbarmachung langfristig erarbeiteten Know-hows. Jedoch zwingen die derzeitigen personalwirtschaftlichen Randbedingungen mit ca. 70 % der dort anfallenden Arbeiten befristet beschäftigtes Personal zu beauftragen (s. Abb. 1).

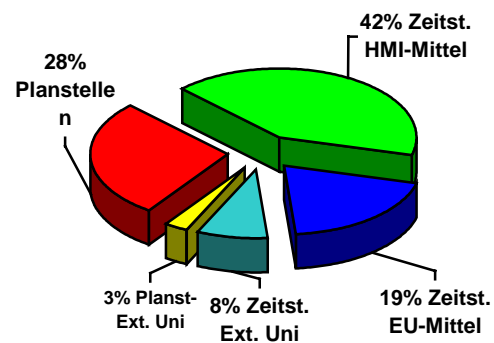


Abb. 1: Wissenschaftliches Personal an den wichtigsten 13 Hauptgeräten im Nutzerdienst.

BENSC-Nutzerdienst

Die Dienstleistung von BENSC für Wissenschaftler von deutschen Universitäten und anderen nationalen und internationalen Forschungsinstituten und -abteilungen wird in zwei Formen erbracht:

- Vergabe von Messzeiten für *Einzelprojekte* externer Gruppen - wobei die Entscheidung im Einzelfall nach wissenschaftlicher Begutachtung durch den international besetzten Nutzausschuss getroffen wird - und intensive wissenschaftliche und technische Unterstützung bei Vorbereitung, Durchführung und Auswertung der Experimente.
- In Kooperationsverträge gefasste wissenschaftliche und technische *Langzeit-Kooperationen*, meist verbunden mit Zusammenarbeit bei der Betreuung einzelner Instrumente am Reaktor und, im Gegenzug, fest zugesagtem Messzeitkontingent für die jeweilige externe Gruppe.

Für die erstgenannten Einzelprojekte ist an den rund 14 Hauptinstrumenten von BENSC ein Anteil von mindestens 50 % der Messzeit reserviert. Weitere 20 % stehen für die genannten Kooperationen zur Verfügung. Für eigene Forschungsprojekte der HMI-Gruppen verbleiben 30 % der Messzeit.

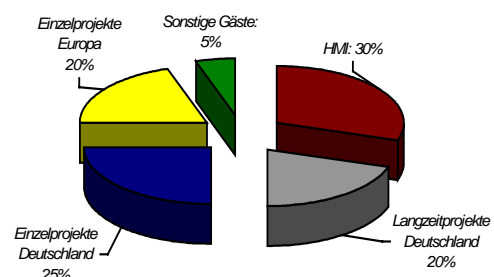


Abb. 2: Verteilung der Experimentzeiten bei BENSC auf die verschiedenen Nutzerklassen

Kooperationen zum Nutzerdienst

Die enge Zusammenarbeit von BENSCH mit vertraglichen Kooperationspartnern dient nicht allein den jeweiligen Partnern, sondern verstärkt zugleich die personellen Kapazitäten an den Instrumenten und erweitert die Möglichkeiten der wissenschaftlichen Betreuung aller Gäste. So hat BENSCH auf dem wichtigen Zukunftsfeld der "Weichen Materie", das bislang nicht zu den erklärten eigenen Forschungsschwerpunkten des HMI gehörte, durch Kooperationen mit der TU Darmstadt (Prof. Dencher), dem I.-N.-Stranski Institut der TU Berlin (Prof. Findenegg) und dem Max-Planck-Institut für Kolloid und Grenzflächenforschung (Prof. Möhwald) die für eine angemessene Betreuung der Gastgruppen notwendige vor-Ort-Expertise verstärkt.

Die wichtigsten vertraglichen Langzeit-Kooperationspartner aus der Region Berlin-Brandenburg sind derzeit

- I.N.Stranski Inst. für Physikalische und Theoretische Chemie
Technische Universität Berlin
(Prof. G.H. Findenegg)
- **Max-Planck-Institut für Kolloid und Grenzflächenforschung, Golm/Potsdam**
(Prof Dr. H. Möhwald)
- Inst. für Werkzeugmaschinen und Fertigungstechnik
Technische Universität Berlin
(Prof. E. Uhlmann)
- **Technische Fachhochschule Berlin.**
(Prof. W. Treimer)

Weitere langzeitige nationale Vertragspartner von den Hochschulen sind

- Institut für Kristallographie,
Universität Tübingen
(Prof. W. Prandl)
- Institut für Biochemie
Technische Univ. Darmstadt
(Prof. N. Dencher)
- Institut für Physikalische Biologie
Universität Düsseldorf
(Prof. G. Büldt)
- FB Materialwissenschaften
Technische Universität Darmstadt
(Prof. H. Hahn)
- Institut für Festkörperphysik
Technische Universität Darmstadt
(Prof. H. Wipf)
- Lehrstuhl für Experimentalphysik
Universität Augsburg
(Prof. A. Loidl)

Zwei weitere bisherige vertragliche Kooperationen, die mit der **TU Dresden** und die mit der **Universität Hannover**, ruhen derzeit (Probleme der Personalrekrutierung).

Einzelprojekte von Gastgruppen

Der Schwerpunkt des BENSCH-Nutzerdienstes ist die Bereitstellung von Messzeiten für *Einzelprojekte* externer Gruppen - nach Begutachtung der jeweiligen Projekte durch den international besetzten Nutzerausschuss - und die intensive technische und wissenschaftliche Betreuung der Gastgruppen. Das Service-Angebot richtet sich nicht nur an deutsche Gruppen, sondern an die gesamte internationale Nutzergemeinde der Neutronenstreuer.

Jahr 2000	Deutschland	Westeuropa EU und EU-assozierte in Mittelost-Europa	Sonstige, NIS Japan, USA, Australien Indien, China
Projekte	100	105	25
Besuche	140	195	35
Namen	100	155	35

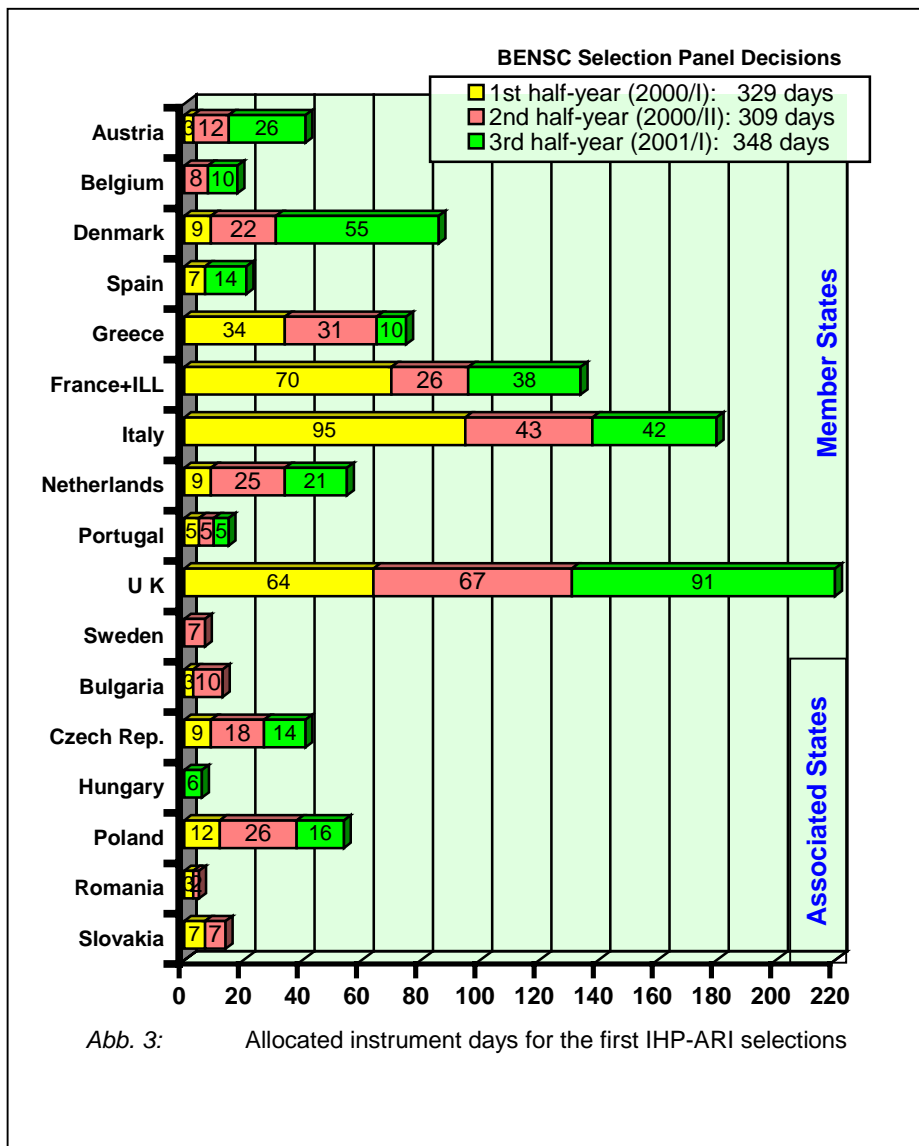
*NIS: New Independence States

Tabelle 1:
Anzahl der einzelnen Projekte im Jahr 2000 und der für diese Experimente verzeichneten Besuche von externen Nutzern.

Die BENSCH Nutzerstatistik verzeichnete im Jahr 2000 etwa 230 verschiedene Einzelprojekte mit 370 Besuchen durch insgesamt rund 300 individuelle Wissenschaftler. Der Anteil der Gäste von deutschen Instituten, der in den letzten Jahren immer um 45% gelegen hatte, ist relativ auf unter 40% gesunken, während die Zahl der Gäste aus Europa weiter stieg. Die deutschen Gastnutzer kamen in 2000 wieder von über 30 verschiedenen Universitäten und 10 hochschulfreien Instituten.

BENSCH als Europäische Neutronenquelle, Drittmittel der Europäischen Kommission

Die bemerkenswert hohen Zahlen für die europäischen Gäste bei BENSCH sind stimuliert durch erfolgreiche Einwerbung von EU-Mitteln aus den Programmen der Europäischen Kommission zur Unterstützung des transnationalen Zugangs zu Großforschungsanlagen. Die BENSCH und den BENSCH-Gästen hieraus jährlich zur Verfügung stehenden Mittel stiegen mit dem aktuellen seit Februar 2000 bis ins Jahr 2003 laufendem Vertrag auf jährlich 500.000 Euro.



Die experimentellen Ergebnisse aller Projekte der Gastgruppen werden als "Interim Reports" in jährlichen HMI-Berichten zusammengefasst veröffentlicht. Die "BENSC Experimental Reports 2000", HMI-B 576, enthalten wieder 220 Einzelberichte, an denen insgesamt rund 450 Autoren beteiligt sind.

Liste der Veröffentlichungen

Die Anzahl der BENSC-Veröffentlichungen in anerkannten referierten Zeitschriften hat einen hohen Stand von **jährlich über 160 Publikationen** erreicht. Bei diesen Publikationen treten in der Regel sowohl die Gäste als auch die mit ihnen kooperierenden HMI-Mitarbeiter gemeinsam als Autoren auf; bei 2/3 bis 3/4 der Arbeiten sind jedoch die Gäste federführend.

Eine komplette Veröffentlichungsstatistik 2000 für BENSC wird im oben genannten HMI-Bericht **HMI-B 576** abgedruckt und füllt dort 40 Seiten. Da der größte Teil dieser Veröffentlichungen ohne-

Eine Analyse der Verteilung der Messzeiten für die Gäste auf die einzelnen Länder zeigt, dass nicht nur Länder ohne geeignete Neutronenquellen wie Italien, Griechenland und Spanien recht hoch vertreten sind; sondern auch England und Frankreich starke Kontingente stellen, da von dort viele potente Gruppen zu BENSC kommen, um von Geräten und Optionen zu profitieren, die ihre nationalen Neutronenquellen oder das ILL Grenoble nicht bieten. Der deutliche Zuwachs bei den Projekten aus Dänemark und England ist zudem korreliert mit der unerwarteten Schließung des Reaktors in Risoe.

Wissenschaftliche Ergebnisse der Gastgruppen

Die wissenschaftlichen Ergebnisse aus den BENSC-Experimenten der Gastgruppen schlagen sich nieder in Diplom- und Doktorarbeiten, sowie in Konferenzbeiträgen und Veröffentlichungen.

Unsere Listen für die Gäste verzeichnen für 2000 bislang **8 Diplom- und Studienarbeiten**, davon 5 an ausländischen (Athen (2), Cadiz, Moskau (2)) und **13 Doktorarbeiten**, davon auch wieder die Mehrzahl (9) im Ausland (Athen(2), Edinburgh (2), Krakau, Leuven, London, Madrid, Prag).

hin bei den wissenschaftlichen Abteilungen der beteiligten HMI-Autoren angegeben ist, wird hier auf eine separate Einzelaufzählung verzichtet. Genannt seien nur die Gesamtzahlen der aufgelisteten BENSC-Veröffentlichungen:

BENSC-Veröffentlichungen in referierten Journalen und Büchern	Gesamt (Gastgruppen + HMI)
Nachtrag für 1998/1999	10
Erscheinungsdatum 2000	280

Anzahl der Beiträge 2000 auf Konferenzen und in Seminaren	390
davon	
- Eingeladene Vorträge	90
- Sonstige Vorträge	130
- Posterbeiträge	170

Drittmittel für Gästebetrieb BENSC

- Europäische Kommission
Human Potential Programme, TMR-LSF
(contract ERB FMGE CT950060):
European Access to BENSC,
(4/1996-4/2000), (Gesamtbetrag über 4 Jahre:
1638 000 Euro)
- Europäische Kommission
Human Potential Programme, Transnational
Access to Research Infrastructures, IHP-ARI
(contract HPRI-1999-00020):
European Access to BENSC-BER2,
(2/2000-1/2003), (Gesamtbetrag über 3 Jahre:
1500 000 Euro)
- Europäische Kommission
TMR-Concerted Action (ERB FMGE CT970091)
"Neutron Round Table"
(Mittelabrechnung über Risø National Lab.)
- Verbundforschung
(über die Universitäten Tübingen und Darm-
stadt)
Betrieb der Instrumente E2 und V1
Personalmittel für ½ Techniker und je einen
Wissenschaftler.

Experimente der Bestrahlungsanlage B8

Im Berichtsjahr wurde die Bestrahlungsanlage B8, die für Bestrahlungen von Gemälden mit kalten Neutronen optimiert ist, organisatorisch und inhaltlich BENSC angegliedert. Die Verantwortung für das Instrument und die Betreuung der Projekte/Kooperationen wurden nach dem Ausscheiden von Dr. C.O. Fischer von Frau Dr. Schröder-Smeibidl übernommen.

Die Langzeitkooperation (C. Laurenze-Landsberg, C. Schmidt, Prof. Kelch) mit den Staatlichen Museen zu Berlin, der Gemäldegalerie Berlin wurde weitergeführt. Im abgelaufenen Jahr wurden erfolgreich zwei neutronenautoradiographische Bestrahlungen mit anschließender Analyse durchgeführt. Bestrahlt wurden die Gemälde "Das Konzert" des niederländischen Genremalers Gerard ter Borch (1617 – 1681), entstanden um 1675, und das Gemälde „Raub der Proserpina“ von Harmensz van Rijn Rembrandt (1606 – 1669), entstanden um 1630. In beiden Fällen dienten die Bestrahlungen der Unterstützung und Dokumentation des Prozesses der Restaurierung. Die Interpretation der Autoradiogramme ist noch nicht abgeschlossen.

Fortgesetzt wurde auch die Kooperation mit dem Geoforschungszentrum Potsdam (Prof. Romer). Auch hier wurden mehrere Bestrahlungen an Bohrkernen durchgeführt. Es konnte der Bor-Gehalt in Gesteinsmaterial, das von Fluiden durchzogen ist, bestimmt werden. Aus der Bor-Konzentration erhält man Aussagen über die Entstehungsgeschichte der Gesteine.

In einem weiteren Projekt mit dem Beschleunigerlabor der LMU/TU München wurden hochreine Kupferfolien mit kalten Neutronen bestrahlt, um eine experimentelle Obergrenze für den Wirkungsquerschnitt der Reaktion $^{63}\text{Cu}(n,p)^{63}\text{Ni}$ zu erhalten. Im

Rahmen einer Doktorarbeit des strahlenbiologischen Instituts der LMU München (G. Rugel, Prof. Kellerer) soll in einer Retrospektive die Neutronendosis der Atombombenüberlebenden von Hiroshima ermittelt werden. Der Wirkungsquerschnitt der $^{63}\text{Cu}(n,p)^{63}\text{Ni}$ -Reaktion wird nach der Bestrahlung durch die direkte Messung des Anteils an entstandenem ^{63}Ni mit Beschleunigermassenspektrometrie am Beschleunigerlabor in Garching bestimmt. Die Auswertungen dauern noch an. Hintergrund der Untersuchungen ist die Vermutung, daß die Neutronendosis in Hiroshima stark unterschätzt worden sein könnte. Wegen seiner Halbwertszeit (^{63}Ni , $\tau \sim 100$ a) kann auch heute noch in damals der Bombe ausgesetzten Cu-Teilen das durch schnelle Neutronen erzeugte Ni-Isotop nachgewiesen werden. Sollte die Vermutung sich bestätigen lassen, müßten die gegenwärtigen Risikoabschätzungen im Strahlenschutz neu überdacht werden.

Ertüchtigung von Komponenten der Bestrahlungsanlage B8

Durch technische Verbesserungen konnte die Abschirmung der Anlage deutlich verbessert werden, so daß der Einfluß auf benachbarte Experimente verringert werden konnte. Außerdem wurde im Berichtsjahr eine grundlegende Modernisierung des Instruments begonnen. Schrittweise werden Komponenten insbesondere bei der Gammaskopie erneuert und den Erfordernissen, die wertvolle Gemälde an das experimentelle Umfeld stellen, angepasst.

Die wissenschaftlichen Ergebnisse des Jahres 2000 aus den BENSC-Aktivitäten der Abteilungen SF1 – SF3 befinden sich in den entsprechenden Abschnitten SF1 – SF3 des Berichtes.

NAA-Labor und Bestrahlungsdienst am BER II

Verantwortlich: Prof. Dr. D. Behne

Der Bestrahlungsdienst am BER II und das Labor für Neutronen-Aktivierungsanalyse (NAAL) stellen Experimentiertechniken zur Verfügung, bei denen kernchemische Reaktionen mit Neutronen ausgenutzt werden.

Anwendungsgebiete sind:

- Neutronen-Aktivierungsanalyse (NAA) zur Spurenelementanalytik in Medizin, Umwelt und Reinstoff-Forschung.
- Erzeugung von radioaktiven Quellen und Tracern für Mößbauer-Spektrometrie, gestörte Winkelkorrelation und verschiedene Tracertechniken.
- Elementumwandlung in Festkörpern und Erzeugung von Strahlenschäden für die Halbleiterforschung.

Externe Nutzergruppen insgesamt 20

Anwendungsgebiete

NAA	13 (65 %)
Quellen/Tracer/Strahlenschäden	7 (35 %)

Zahl der Einzelprojekte 10

(Anzahl der neuen Bestrahlungsanträge, in denen jeweils eine bestimmte Matrix charakterisiert wird und die Grenzwerte für die Bestrahlungsparameter definiert werden)

Anwendungsgebiete

NAA	3 (30 %)
Quellen/Tracer/Strahlenschäden	7 (70 %)
Herkunft der Nutzer	
HMI (Abt. SF6)	4 (40 %)
externe Nutzer	6 (60 %)
(inkl. anderer HMI-Gruppen)	

Ausgeführte Bestrahlungsexperimente 219

(Bei Langzeitbestrahlungen werden in einem Experiment simultan bis zu 24 Einzelproben bestrahlt. Bei der Verwendung der beiden Kurzzeit-Bestrahlungsvorrichtungen umfaßt ein Experiment die sequenzielle Bestrahlung von bis zu 50 Proben)

Anwendungsgebiete

NAA	190 (87 %)
Quellen/Tracer/Strahlenschäden	29 (13 %)
Herkunft der Nutzer	
HMI (Abt. SF6)	51 (23 %)
externe Nutzer	168 (77 %)
(incl. anderer HMI-Gruppen)	

Langzeitbestrahlung biologischer Proben für die NAA (1140 Einzelproben) 56

Herkunft der Nutzer	
HMI (Abt. SF6)	42 (75 %)
externe Nutzer	14 (25 %)

Liste der Gäste des NAA-Labors 2000 und bearbeitete Themen

Artinger, R.:
FZK, Karlsruhe
Aktivierung von FE

Berger, A.:
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, BAM, Fachgruppe I.4
Antimon in Silizium
Spurenelemente in Wolfram
Kupfer

Hafner, S., Stanek, J.:
Universität Marburg, Institut für Mineralogie
Aktivierung von Mg₃TeO₆

Hans, M.:
Universität Marburg Fachbereich Mikrobiologie
W und Mo in Enzymen

Henkelmann, R; Lin, X.:
TU München, Institut für Radiochemie
Flusssonden (Bestimmung des Neutronenspektrums in der DBVK)
Spurenelementbestimmung in Haaren
Spurenelemente in NaCl-Lösungen, nach Auslaugversuchen

Jentsch, T.:
TU Dresden, Institut für Strahlenschutzphysik
Spurenelemente in Glasmaterial

Mayer, O.:
Universität Bayreuth, Mikrobiologie
Se, Mo, Fe in Enzymen (Kohlenmonoxid-Dehydrogenase)

Nopitsch, K.:
Siemens, Erlangen, Abt. NT2
Aktivierung von Argon

Ortega, R., Deves, G.:
CNRS, Bordeaux
Spurenelemente in Reis und Bodenproben

Pich, A.:
Universität Halle, Institut für Mikrobiologie
Metalle in Enzymen (AOR)

Pomper, B.:
MPI Marburg
Mo, W in Enzymen

Popa, I.; Riederer, I.:
Rathgen Forschungslabor, Berlin
Spurenelementanalyse von Ockerpigmenten

Rätzke, K.:
Universität Kiel
Aktivierung Silber

Rittweger, J.:
FU Berlin, Inst. für Physiologie
Spurenelemente in Primatenknochen

Rösch, F.:
 Universität Mainz; Institut für Kernchemie
Aktivierung von Yb
Aktivierung von Wolfram
Aktivierung von Zr-Granulat

Seher, A.:
 BASF, Ludwigshafen
Aktivierung von Argon und Natrium für Trace-
untersuchungen

Tröger, W.:
 Universität Leipzig
Aktivierung von Zirkonwolframat

Vivoli, G.:
 Universität Modena
Spurenelemente in Fußnägeln ALS-Studie (A-
myotrophic Lateral Sclerosis)

Voitsch, A.:
 Schott Glas, Jena
Bestimmung des Chlorgehaltes in Quarzglas
Spurenelemente in Quarzglas

Vorholt, J.:
 Universität Marburg
Mo, W in Enzymen (Nitrogenasen)

Die wissenschaftlichen Ergebnisse des Jahres 2000 der Abteilung SF6 befinden sich in dem entsprechenden Abschnitt des Berichtes.

- Hochenergie- γ -Meßplatz für PIXE (Proton Induced X-Ray Emission),

für die Materialmodifikation

- Folienbestrahlungsplatz,
- Hoch- und Tieftemperaturplatz,
- μ -Metallkammer mit Elektronenspektrometer,

für die Arbeiten mit nuklearen Sonden

- β -NMR Platz,
- Mößbauerspektroskopie,
- Meßplatz für PAD (Perturbed Angular Distribution),
- Aktivierungsplatz für PAC Isotope (Perturbed Angular Correlation),

für medizinische Anwendungen

- Protonentherapie von Augentumoren,

außerdem

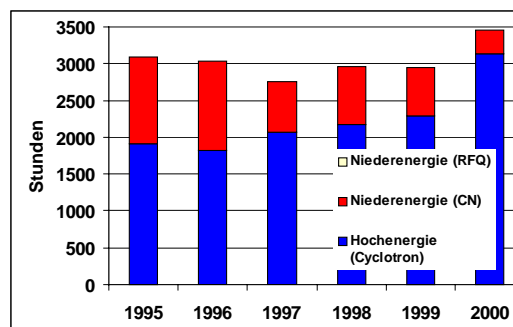
- Senkrechtstrahlplatz und
- große Streukammer

Zusätzlich sind an der ECRIS4 noch 4 Targetplätze für extrem langsame Ionen vorhanden.

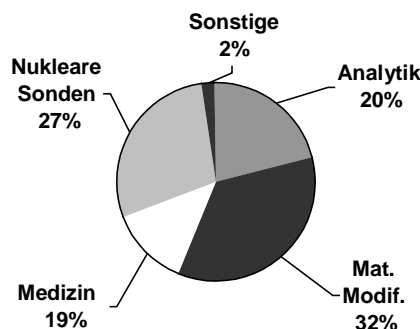
Nutzung im Berichtszeitraum

Rund 3200 Stunden Strahl am Target wurden im Jahre 2000 abgeliefert, davon mehr als 750 mit dem neuen RFQ Injektor.

Anteil der Nieder- und Hochenergiestrahlen an der Strahlzeit



Nutzungen nach Sachgebieten



ISL

Ionenstrahllabor Berlin

Verantwortlich: Dr. H. Homeyer

Das Ionenstrahllabor ISL bietet Gästen deutscher und ausländischer Forschungsinstitute sowie industriellen Forschungsgruppen die Nutzung seiner Beschleuniger und experimentellen Einrichtungen an. Es ist ein Großgerät der Verbundforschung.

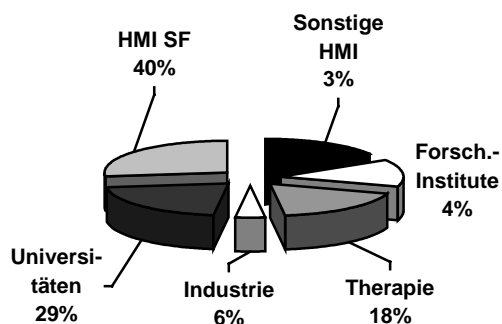
Den Zugang regelt ein mit externen und internen Gutachtern besetzter Nutzerausschuss. Er genehmigt Anträge auf Strahlzeit in Höhe der Kapazität von derzeit 3600 Strahlzeitstunden pro Jahr unter Berücksichtigung der wissenschaftlichen Qualität der Experimentvorschläge.

Nutzern werden die Strahlen vom ISL-Personal entsprechend der vom Experiment festgelegten Spezifikation angeliefert. Zur Zeit sind 15 Experimentierplätze betriebsbereit und zwar

für die Ionenstrahlanalytik

- Flugzeitspektrometer für ERDA (Elastic-Recoil-Detection-Analysis),
- Magnetspektrometer (Q3D) für ERDA an extrem dünnen Schichten,
- Streukammer für RBS (Rutherford-Back-Scattering) ,
- Niederenergie- γ -Meßplatz für die Wasserstoff-Profilanalyse

Aufteilung nach Nutzern



21 Forschungsgruppen erhielten Strahlzeit für 40 verschiedene Experimente an den 15 verschiedenen Targetplätzen. Die Aufteilung der Strahlzeit nach Sachgebieten und Herkunft der Nutzer zeigen die nebenstehenden Graphiken: Es wird deutlich, dass die Schwerpunkte der Anwendungen von hochenergetischen Ionenstrahlen, die **Analytik**, die **Materialmodifikation**, die **Therapie** und die **Forschung mit nuklearen Sonden** fast gleiche Anteile an der Strahlzeit erhalten. Bei der Analytik sind besonders die **Hochenergie-ERDA** und die **charakteristische Röntgenemission** induziert durch **hochenergetische Protonen** wegen der spezifischen Ergebnisse besonders interessant.

Nach der Eigennutzung (gesamter HMI Anteil 43%) haben Universitätsgruppen und die Therapie den größten Anteil an Strahlzeit.

Bei den Forschungsgruppen der Universitäten wiederum haben Forschungsthemen zur Materialmodifikation und zur Ion-Festkörper-Wechselwirkung an Bedeutung gewonnen. Der Anteil der Gäste beträgt jetzt nahezu 60%. Hier zeigt sich die weiterhin zunehmende Attraktivität der Anlage für externe Nutzer, wobei die Nachfrage nach Hochenergiestrahlen bei weitem überwiegt. Für einen Großteil der Nutzer werden Analysen und Bestrahlungen vom ISL Personal erbracht.

Im Rahmen der Therapie wurden in den bisher 2.5 Betriebsjahren 166 Patienten bestrahlt.

FuE Vorhaben in Zusammenarbeit mit der Industrie konzentrieren sich weiterhin auf die Bestrahlungen von Polymerfolien zur Produktion von Mikrofiltern einmaliger Qualität. Die neuen Anwendungsgebiete erfordern spezifische Bestrahlungstechniken, die hier erstmalig erprobt werden.

Veröffentlichungen der ISL-Gastgruppen

Zur Drucklegung lagen die Beiträge noch nicht vor.

Die wissenschaftlichen Ergebnisse des Jahres 2000 der Abteilung SF4 befinden sich in dem entsprechenden Abschnitt des Berichtes.

Abteilung

SF1 Methoden und Instrumente

Die Wissenschaftler der Abteilung betreuen einen wesentlichen Teil des Nutzerbetriebs bei BENSC. Hierzu gehören der Aufbau, Betrieb und die laufende Modernisierung etwa der Hälfte des Instrumentenparks am Reaktor BER II. Mit besonderem Nachdruck wird dabei die Erweiterung der Leistungsfähigkeit von BENSC auf dem Gebiet der Untersuchung komplexer und nanostrukturierter Materien und unter extremen Bedingungen, wie sehr hohe Magnetfelder und sehr niedriger Temperaturen verfolgt.

Schwerpunkt der Forschungstätigkeit ist die Entwicklung neuer Methoden der Neutronenstreuung für Neutronenquellen der Zukunft. Dabei liegt ein besonderer Akzent auf der Entwicklung von Spallationsquellen sowie daran angepasster Instrumentierungskonzepte. Dieser Schwerpunkt wird in einer breiten internationalen Zusammenarbeit verfolgt, wobei das HMI diese Zusammenarbeit als „leitendes Laboratorium“ im Rahmen des Projektes „European Spallation Source (ESS)“ koordiniert. Diese Arbeiten werden ergänzt durch kernphysikalische Untersuchungen zum Spallationsprozess mit hochenergetischen Protonen und sind eingebunden in ein HGF-Strategiefondsprojekt, das gemeinsam mit dem FZJ durchgeführt wird.

Andere wichtige Themenkreise bei der Erforschung neuer Methoden der Neutronenstreuung sind die Entwicklung leistungsfähigerer Neutronenpolarisatoren und neuartiger Polarisatorsysteme, die Erweiterung der Anwendungsmöglichkeiten von höchstauflösender Neutronenspektroskopie, insbesondere zur Untersuchung elementarer Anregungen und sehr langsamer, bisher nur optischer Spektroskopie zugänglicher atomarer Prozesse, die Anwendung von Neutronenreflektometrie in der Untersuchung von Oberflächen und Grenzflächen, insbesondere in Schichtsystemen.

Neue Aspekte dieser Entwicklungen sind Ansätze und Techniken für die Anwendung von Röntgenstrahlung in der Erforschung kondensierter Materie. Dabei werden hauptsächlich die Übertragung der Methoden inelastischer Neutronenstreuung auf Röntgenstreuung im Hinblick auf zukünftige Quellen mit erhöhter Luminosität untersucht.

Im Rahmen der Eigenforschung auf dem Gebiet der Physik der kondensierten Materie werden mit Nachdruck kollektive Phänomene in komplexen, stark ungeordneten und mesoskopisch strukturierten Materialien untersucht. Dabei werden kollektive Anregungen und Relaxation in Spingläsern und anderen komplexen Strukturen ebenso studiert wie Diffusion und Materialtransport in biologisch relevanten Systemen und Prozesse von Selbstorganisation in komplexen Flüssigkeiten.

BENSC – Aktivitäten

BENSC-Instrumentbetreuung

Die Abteilung SF1 betreut im Rahmen des BENSC-Nutzerbetriebs folgende Instrumente:

- (E8) Einkristalldiffraktometer, TFH Berlin
- V2 3-Achsenspektrometer FLEX
- V3 Flugzeitspektrometer NEAT
- V5 Spinecho-Spektrometer SPAN
- V6 Reflektometer
- V9 Perfect Crystal Neutron Interferometer
- V11 β -NMR, Uni Hannover
- V12a Doppel-Kristall-Diffraktometer
- V12b -, -, TFH Berlin
- V13 Meßplatz Grundlagen-Physik
- V14 Meßplatz Neutronenspiegel

sowie der Standard-Probenumgebungen, Neutronenleiter und Entwicklung der Superspiegel.

Entwicklung neuer Methoden der Neutronenstreuung

Der Anspruch, die Untersuchung kondensierter Materie mit Neutronenstreuung im HMI auf hohem Niveau zu halten und den Nutzern gleichzeitig hochwertige Meßmöglichkeiten anzubieten, setzt ständige, vielseitige Forschungstätigkeit auf methodisch-instrumenteller Ebene voraus. Tradition haben in der Abteilung vor allem Entwicklungen auf dem Gebiet polarisierter Neutronen (Neutro-

nen-Spin-Echo-Spektroskopie, Neutronen-Superspiegel, fortgeschrittene Neutronenoptische Systeme), die Weiterentwicklung eines Neutronenstrahls für Anwendungen in der Grundlagenphysik (elektrisches Dipolmoment und Lebensdauer von Neutronen) sowie zur Untersuchung der Dynamik von He³ in schwach konzentrierten Lösungen. Die Weiterentwicklung der Neutronen-Spin-Echo Spektroskopie umfasst sowohl Methoden zur Erhöhung der Strahlintensität und Erweiterung des Wellenbereichs, als auch die Erweiterungen der Anwendungen auf die Untersuchung von langlebigen angeregten Zuständen in Isolatoren und Halbleitern.

Weiterentwicklung des Neutronen-Spin-Echo-Spektrometers SPAN (V5)

Im Jahr 2000 wurde die Zahl der mit remanenten Superspiegel ausgestatteten Detektoren von 18 auf 34 erhöht, so daß Anfang 2001 eine dritte Detektorbank für NSE Messungen in Betrieb genommen werden kann. Dadurch werden zum ersten Mal NSE Messungen simultan um drei unabhängige Streuwinkel möglich.

Durch den Einbau eines neuartigen Neutronen Geschwindigkeitsselektors wurde auch der Wellenlängenbereich zwischen 2.5 Å und 3.8 Å für Messungen zugänglich. Damit kann jetzt die gesamte Wellenlängebreite des Neutronenleiters NL4a ($2.5 \leq \lambda \leq 10$ Å) für NSE und TOF Messungen benutzt werden. Bei $\lambda_{\min}=2.5$ Å können Messungen bis zu $Q_{\max} = 5 \text{ \AA}^{-1}$ durchgeführt werden. Die aktuelle Magnetfeldkonfiguration von SPAN erlaubt NSE-Messungen in einem Energiebereich von

$1.2 \text{ meV} \geq \omega \geq 2.4 \text{ } \mu\text{eV}$ bei $\lambda=2.5 \text{ } \text{Å}$ und $29 \text{ } \mu\text{eV} \geq \omega \geq 58 \text{ neV}$ bei $\lambda=10 \text{ Å}$.

Weiterentwicklung des Reflektometers

Für Festkörper-Proben steht nun ein amagnetischer Drehtisch zur Verfügung. Hiermit kann der Azimutwinkel der Probe zwischen 0° und 360° mit einer Genauigkeit von ca. 0.1° eingestellt werden. Mögliche Anwendungen sind hier die Bestimmung von magnetischen oder strukturellen in-plane-Anisotropien.

Für magnetische Untersuchungen wurde ein Gaussmeter installiert, mit dem auch während der Messungen das äußere Magnetfeld kontrolliert werden kann. Dies ist z. B. für Experimente an Proben wichtig, die einen sogenannten „exchange-bias“-Effekt zeigen. Bei diesen Proben müssen relativ kleine Magnetfelder (ca. 20 Gauss) genau eingestellt und kontrolliert werden. Das Gaussmeter kann mit der Steuer-Software CARESS ausgelesen werden.

Sämtliche Motoren zur Steuerung des Monochromators wurden in die Steuer-Software CARESS eingebunden und können nun automatisch gefahren werden.

Die alten Graphit-Monochromator-Kristalle mit einer Mosaizität entsprechend $\Delta\lambda/\lambda=8\%$ wurden durch solche mit einer Mosaizität von $\Delta\lambda/\lambda=2\%$ ersetzt und so die Intensität um 20% erhöht. Die Schwierigkeit bestand dabei darin, die einzelnen Kristalle auf 0.1° genau zu justieren. Dies konnte durch eine spezielle Montagehilfe für das Aufkleben der Kristalle erreicht werden. Die Kontrolle erfolgte optisch mittels Laser-Reflektometrie.

Dreiachsenspektrometer FLEX 2)

Die mit der NRSE-Option durchgeführten Experimente zeigten, daß einige Komponenten Potential zur instrumentellen Weiterentwicklung besitzen.

Wird FLEX mit der NRSE-Option ausgestattet, werden die Spinecho-Arme als unabhängige Elemente zwischen Monochromator und Probe sowie Probe und Analysator eingefügt. Die Positioniergenauigkeit des Dreiachsenspektrometers FLEX bleibt dabei voll erhalten. Optimierungsbedarf bestand hinsichtlich der Anpassung der Pneumatiksteuerung der Spinecho-Arme. Mit Abschluß der Arbeiten im ersten Halbjahr 2001 ist die NRSE-Option voll durch die Pneumatik von FLEX ansteuerbar. Die Luftfüße werden dann nur für die Dauer einer Spektrometerbewegung unter Druckluft gesetzt.

Mit der Umstellung der Spulen Kühlung von hausinternem 20° -Kühlwasser auf einen eigenen Sekundärkühlkreislauf wurde begonnen. Es wird erwartet, daß eine Steigerung des maximalen Spinecho-Felds (technisch durch Kühlung begrenzt) möglich wird.

Zur Erweiterung der nutzbaren Strahlintensität wird derzeit in Zusammenarbeit mit dem Max-Planck-Institut Stuttgart ein neuer Satz von Hochfrequenz-Spinflippern entwickelt, der den Strahlquerschnitt von $30 \times 30 \text{ mm}^2$ (bei 45° Kippwinkel) auf $35 \times 50 \text{ mm}^2$ erweitern wird. Die Konstruktion lag hierbei beim MPI für Festkörperphysik, Stuttgart. Sie ist abgeschlossen, sodass der Beginn der Fertigung in der HMI-Zentralwerkstatt im Januar 2001 mit der Herstellung eines Prototypen beginnt, anhand dessen Fragen zu konstruktiven Details und Materi-

alfragen beantwortet werden können, bevor die endgültige Fertigung der vollen Stückzahlen erfolgt. Teil dieses Projekts ist die Fertigung von Leistungs-HF-Elektronik zur Impedanzanpassung an die neuen HF-Spinflipper-Spulen, die weitestgehend abgeschlossen ist.

In Zusammenarbeit mit T.M. Rekveldt und W. Bowman von der TU-Delft konnten durch Spinecho erweiterte Kleinwinkelstreuung (SESANS) und durch Spinecho erweiterte Reflektometrie mit dem bestehenden NRSE-Aufbau experimentell getestet werden, ebenso wie die Larmor-Diffraktionsmethode für Problemstellungen der Materialforschung. Das Interesse galt hier der Verteilung von Gitterkonstanten einer mechanisch deformierten und anschließend thermisch behandelten Al-Legierung. Die Ergebnisse lassen Rückschlüsse auf mikroskopische Prozesse zu, an denen zwei koexistierende Gitterverteilungen beteiligt sind.

Mit der Larmor-Diffraktion wurde ferner eine Problemstellung aus der Strukturforschung, nämlich die Existenz einer trigonalen Gitterdeformation in CoO experimentell untersucht.

Die Verteilung von Gitterkonstanten einer Probe von interkaliertem Graphit - ein vielversprechendes Monochromatormaterial wurde ebenfalls in Larmordiffraktionsexperimenten untersucht. Bei großer Mosaizität ($\eta \approx 3.5^\circ$) besaß die untersuchte Probe eine unerwartet scharfe Gitterkonstantenverteilung im Bereich $\Delta d/d = 2 \times 10^{-3}$.

Flugzeitspektrometer NEAT (V3)

Im Rahmen der Weiterentwicklung der Flugzeitmethode wurde ein Teil der Strahlzeit für Test und Inbetriebnahme bis dahin ungenutzter Möglichkeiten des Spektrometers verwendet, und zwar Flugzeitdiffraktion mit 140 Einzeldetektorbänken, sowie inelastische Streuexperimente unter Verwendung des zweidimensionalen Multidetektors bei kleinen und bei großen Streuwinkeln.

Flugzeitdiffraktion: Es konnte gezeigt werden, daß mit einem breiten einfallenden Wellenlängenband (ca. 1.8 bis 20 Å) Strukturen mit großen Gitterkonstanten sehr gut untersucht werden können, was insbesondere für die 'in situ' Struktur-Analyse biologischer Membranen, im Rahmen inelastischer Streuexperimente unter identischen Bedingungen von Interesse ist.

Multidetektor bei großen Streuwinkeln: Dieser Detektor erlaubt die Verwendung höherer Energieauflösung, gleichzeitig (auf Grund der 4096 Detektorelemente) mit besserer Auflösung im Q-Raum. Dies konnte durch die Untersuchung der kritischen inelastischen Streuung im Zusammenhang mit einem kommensurabel-inkommensurablen Phasenübergang, in der Umgebung eines Satelliten Peaks demonstriert werden. Dabei gelang erstmalig die Zerlegung eines 'zentralen' Peaks in eine elastische und eine nicht-elastische Komponente.

Multidetektor bei kleinen Streuwinkeln: Im Kleinwinkelbereich konnte zunächst die Meßbarkeit zweier bekannter Strukturen (ein poröses Glas und ein Protein) bestätigt werden. Bei der inelastischen Streuung stehen wegen der hohen Anforderungen an den Untergrund noch Entwicklungsarbeiten an.

F. Mezei, W. Jauch, Th. Krist, R. E. Lechner, C. Pappas, P. Vorderwisch, K. Habicht, J. Peters, M. Strobl, A. Triolo, H.-J. Peschke, R. Kischnik, H. Fritzsche; G. Steiner, K.H. Degenhardt, Y. Liu, J.

Ollivier, B. Rufflé, J. Pieper, A. Desmedt, J. Hauschild, R. Gatty, E. Hoinkis

Spallation

Dieses Projekt wird im wesentlichen im Rahmen des HGF-Strategiefonds Projektes "Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zum Bau der gepulsten Europäischen Spallations-Neutronenquelle ESS", Teilprojekt Instrumente, durchgeführt.

Softwareentwicklung von neuen Instrumentierungsansätzen, "Flugsimulator" für virtuelle Instrumente

Ziel des Vorhabens ist die Verbesserung und Erweiterung der Leistungsfähigkeit der Instrumente für Spallationsquellen auf allen Gebieten der Forschung mit Neutronenstrahlen, insbesondere für Anwendungen, die heute noch an Reaktorquellen weitaus besser bedient werden. Für die Konzeption und den Bau effizienter Instrumente sollen Computerprogramme entwickelt werden, die es erlauben, den Neutronenflug vom Target/Moderator bis zum Detektor zu simulieren. Durch solche "Flugsimulatoren" sollen verschiedene experimentelle Anforderungen und Quellenparameter untersucht werden. Diese Arbeiten werden

VITESS wurde für das ESS-Projekt weiterentwickelt. Es wurde eingesetzt, um z.B. die Kombination Moderator-Instrument zu optimieren. Daher wurden verschiedene Target-Stationen angewendet, um den Vorschlag für den gleichzeitigen Betrieb zweier Target-Stationen, z.B. eine mit kurzen Pulsen (SPSS) und eine mit langen Pulsen (LPSS), zu bewerten.

Das Programm simuliert das Verhalten eines Neutronenstrahls mit der Monte-Carlo-Methode (MC). VITESS hat eine praktische modulare Struktur. Es besteht aus unabhängigen ausführbaren Programmen (Neutronenleiter, Chopper, Probe etc.). Jedes Modul ändert die Orts- und Geschwindigkeitskoordinaten der eingehenden Neutronen in Abhängigkeit der für dieses Modul eingestellten Parameter und gibt sie (für das Folgemodul) wieder aus. Diese Daten können an jeder Stelle des Instruments ausgegeben (und statistisch bearbeitet) werden.

Das Programm wurde - wie auch während seiner mehrjährigen Entwicklungszeit - durch Simulation einiger Neutronenstreu-Instrumente getestet:

- hochauflösende Kristall-Analysatoren,
- Rückstreu-Spektrometer,
- Spektrometer für Kleinwinkelstreuung (SANS),
- Flugzeit-Instrumente (TOF),
- Pulver-Diffraktometer,
- Neutron-Spin-Echo-Instrumente (NSE),
- Reflektometer.

Beispielsweise konnte aus MC-Simulationen eines Kristall-Analysators oder -Monochromators mit VITESS die genaue Auflösungsfunktion eines Rückstreu-Spektrometers berechnet werden.

Der Vergleich von Moderatoreigenschaften war ein wichtiges Anwendungsgebiet der Instrument-Modellierungen. Das HERMES Projekt am LANSCE in Los Alamos wurde durch MC-Modellrechnungen unterstützt, die zuerst für Experimente an der IRIS am ISIS eingesetzt wurden.

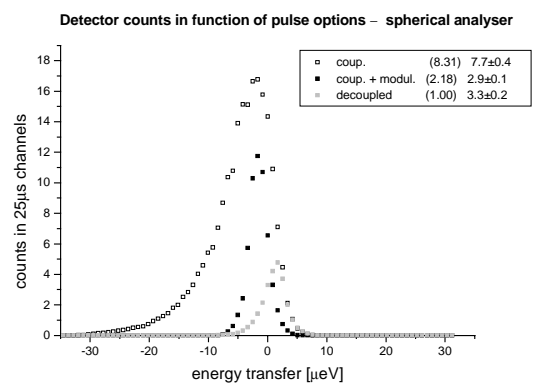


Abb. 1: Pulsformen von 3 Varianten eines LH2-Moderators (entkoppelt-vergiftet, gekoppelt, gekoppelt mit Chopper) wurden zur Bestimmung von Auflösung und Intensitätsverhältnissen simuliert:

Bestehende und geplante SANS-Spektrometer wurden für 3 verschiedene Quellen - kontinuierlich (CW), SPSS, LPSS - miteinander verglichen, um die Leistungsfähigkeit zu erhöhen. Die Simulation des SANS-Instrument V4 am HMI erbrachte hervorragende Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen.

Eines der Ziele des VITESS-Projekts ist es, eine umfassende Studie zu NSE und Instrumenten mit polarisierten Neutronen vorzulegen, denn MC-Rechnungen liefern Informationen, die experimenteller Beobachtung oft nicht leicht zugänglich sind, z.B. die Wellenlängenabhängigkeit der Wirksamkeit von Spin-Flippern, bestimmte Korrelationen im gesamten Instrument oder Details der Wirkung von Streufeldern. Begonnen wurde 2000 mit der Simulation des TOF-NSE-Instrument (IN15), des IN11 und SPAN am HMI.

MC-Simulationen sind für ein TOF-Pulver-Diffraktometer an einer CW- und einer LPSS-Quelle durchgeführt worden. Danach ist ein solches Instrument am KFKI in Budapest gebaut worden. Die Ergebnisse der ersten Messungen sind in hervorragender Übereinstimmung mit der für dieses Instrument berechneten Auflösung.

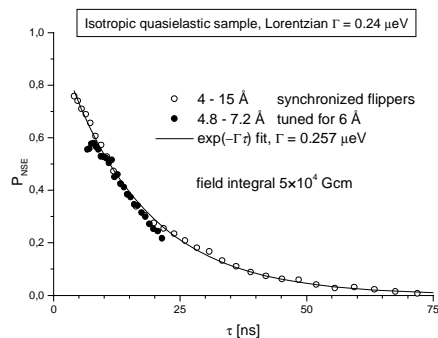


Abb. 2: Ein Vergleich der synchronisierten und abgestimmten Spin-Flipper lässt Schlüsse auf den Wellenlängenbereich zu, in dem NSE-Experimente noch eine gute Annäherung an die Fouriertransformierte $\exp(-\Gamma\tau)$ der Lorentzlinie liefern.

MC-Simulationen zu den Bedingungen für eine verbesserte Intensität und Auflösung des Reflektometers am HMI wurden 2000 begonnen.

F. Mezei, K.Lieutenant, F.Streffer, D. Wechsler, G. Zsigmond

Entwicklung von Instrument-Prototypen für zukünftige Neutronenquellen

Die Technik der Spallation ist die einzige Möglichkeit, um wesentlich über der Leistung existierender Neutronenquellen hinauszugehen. Bisher sind Instrumentierungseinsätze nur für einen Teil der Neutronenstreuexperimente für Spallationquellen konkurrenzfähig ausgearbeitet, getestet und implementiert worden. Ziel des Vorhabens ist es, die Instrumentierungskonzepte für den Einsatz an Spallationquellen experimentell auszuarbeiten und zu testen, um sie später auf Gebieten anzuwenden, auf denen vorher nur Reaktoren benutzt wurden.

Flugzeitdiffraktometer

Die Arbeiten zur Erprobung des Flugzeitmonochromatorkonzepts für hochauflösende Pulverdiffraktion konnten erfolgreich abgeschlossen werden. Hohe Auflösung wurde durch die Anordnung der Detektoren in Rückstreugeometrie erreicht. Neutronen unterhalb von 0,8 Å wurden durch eine geeignete Krümmung des Neutronenleiters eliminiert, da die Gd-Beschichtung der Chopperscheiben für solche Wellenlängen etwas durchlässig wird. Als Testsubstanz wurde eine Probe aus gesintertem Korund gewählt. Zum Vergleich wurde dieselbe Probe auch an dem Standard Pulverdiffraktometer E9 am HMI gemessen. Die Extrapolation der Flugzeit Spektren von der Teststation auf ein voll ausgebautes Instrument mit großer Detektorfläche und optimiertem Neutronenleiter liefert einen 8-fachen Intensitätsgewinn zugunsten des Flugzeitdiffraktometers. Dies zeigt klar, daß auch an einem Reaktor Flugzeitmethoden günstiger sein können als monochromatische Methoden. Der Ausbau des Testinstrumentes zu einem vollwertigen Pulverdiffraktometer erfordert in erster Linie eine Optimierung für die Verwendung geringer

Probenmengen. Das bedeutet einen großflächigen Detektor und eine verbesserte Abschirmung.

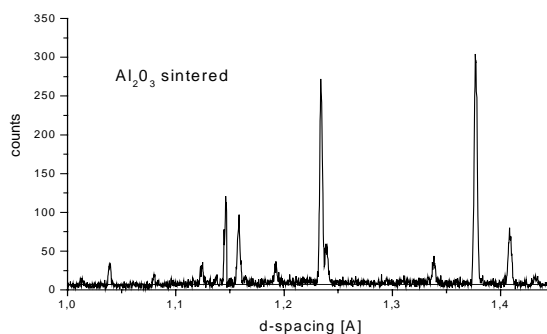


Abb. 3: Pulverspektrum einer Al_2O_3 Probe

Hochauflösendes Flugzeitspektrometer für quasielastische Neutronenstreuung an Spallationsquellen

Überlegungen zur Instrumentierung im Rahmen der AUSTRON-Spallationsquellen-Projektstudie (1998), sowie zum ICANS-XV Meeting (2000) führten zur Entwicklung eines Konzepts für hoch-auflösende quasielastische Neutronenstreuung an Spallationsquellen unter Verwendung von Multichopper-Kaskaden vom NEAT-Typ. Wegen der inhärenten Zeitstruktur des Flugzeitspektrometers ist diese Technik für die Anwendung an Spallationsquellen geradezu prädestiniert. Die Parameter der Kaskade müssen natürlich an die Gegebenheiten der Quelle angepaßt werden. Dafür gibt es in Abhängigkeit von der Wahl des instrumentellen Arbeitsbereichs viele Möglichkeiten. Eine Analyse auf der Basis des Kriteriums, daß der gleiche oder ein ähnlicher Auflösungsbereich erzielt werden soll wie am Spektrometer NEAT, zeigte erstens die Machbarkeit. Zweitens wurde dabei die Möglichkeit eines enormen Intensitätsgewinns gegenüber existierenden Instrumenten dieses Typs sichtbar, welcher an jeder der zur Zeit geplanten zukünftigen Spallationsquellen einem Gewinnfaktor von wenigstens drei Größenordnungen entspricht, der zum Teil aus der Leistungsfähigkeit der Quelle und zum Teil aus anderen Fortschritten bei der Instrumententwicklung resultiert. Zwei neue Instrumentierungsansätze, die Repetition Rate Multiplication, die die Effizienz der Ausbeute an gepulsten Quellen erhöht, sowie ballistische Neutronenleiter zur Strahlführung, die Verluste entscheidend reduzieren, werden in Zusammenarbeit mit Los Alamos National Laboratory an der weltweit leistungsfähigsten Spallationsquelle am LANL experimentell untersucht. Es ist klar, daß solche Gewinnfaktoren die Leistungsfähigkeit dieses differentiellen Spektrometertyps auf ein Niveau heben werden, wie es bisher nur bei integralen Meßmethoden der Diffraktion und Kleinwinkelstreuung bekannt war. Ebenso klar ist, daß dieses Niveau auf dem Gebiet der dynamischen Strukturen dringend benötigt wird, insbesondere dann, wenn es um komplexe biologische Systeme oder solche aus dem Bereich der 'weichen' Materie geht.

F. Mezei, H.J. Bleif, D. Wechsler, R.E. Lechner

Untersuchungen zur Targetstation einer Spallationsquelle

Derzeitige Spallationsquellen werden mit einer Protonenenergie von maximal 0,8 GeV betrieben. Zur Optimierung und Entwicklung von Hochstromtargets, die nach der ESS-Studie bei deutlich höheren Strahlenergien und Leistungen eingesetzt werden sollen, müssen die derzeitigen Simulationsmodelle überprüft und weiterentwickelt werden. Ziel und Motivation des Projektes ist es, hierfür präzise Daten für protoneninduzierte Spallationsreaktionen zu messen und existierende theoretische Modelle bzw. Rechencodes so zu verbessern, daß verlässliche Vorhersagen für die Optimierung, Planung und Konstruktion von Spallations-Neutronen-Quellen gemacht werden können. Hierzu sind vor allem in dem bisher nur sehr fragmentarisch untersuchtem Energiebereich von Protonen oberhalb von 1 GeV systematische experimentelle Daten notwendig. Zur Bestimmung von Materialschädigungsparametern und damit Lebensdauer von Fenster- und Strukturmaterialien der Targetstation ist zum Beispiel eine detaillierte Kenntnis der Produktionsquerschnitte von H und He notwendig.

Die Ergebnisse dieses Projektes sind nicht nur für die geplante ESS Spallationsneutronenquelle von Bedeutung sondern auch für mögliche Anlagen zur Transmutation von radioaktivem Abfall sowie beschleunigergetriebene unterkritische Reaktoren zur Energiegewinnung.

Die Forschungsarbeiten am HMI sind Teil einer Zusammenarbeit und Arbeitsteilung auf nationaler und internationaler Ebene, insbesondere im Rahmen eines gemeinsamen HGF-Strategiefonds-Projektes mit dem FZ Jülich.

Die 1998/99 von der NESSI-Kollaboration (HMI, FZJ, GANIL, Rochester, Warschau) am COSY-Beschleuniger in Jülich durchgeführten Experimente zur Messung von Neutronen in dicken und dünnen Targets sowie von geladenen Teilchen in dünnen Targets wurden ausgewertet und mit verschiedenen theoretischen Modellen verglichen.

Die Auswertung der Neutronen-Multiplizitätsverteilungen und Produktionsquerschnitte an einer Großzahl (160) verschiedener Targetgrößen (0.2-35cm lange Zylinder mit 8-15cm Durchmesser) aus W, Hg und Pb für 0.4, 0.8, 1.2, 1.8 und 2.5 GeV Protonen ist abgeschlossen und die Ergebnisse sind publiziert. Damit steht den Entwicklern von Hochenergie Transport Codes (HETC) ein einmalig detaillierter Datensatz für Benchmark-Tests zur Verfügung. Das besondere der NESSI-Daten ist, dass nicht nur –wie bisher üblich– der Mittelwert der Neutronenmultiplizität bestimmt wurde sondern die Wahrscheinlichkeitsverteilung in einer Spallationsreaktion x Neutronen zu emittieren. Erste Vergleiche der Ergebnisse von HETC-Programmsystemen wie z.B. LAHET, HERMES, FLUKA ergaben bei einigen Codes relativ gute Übereinstimmung für dicke Targets während für dünne Targets wesentliche Abweichungen zwischen Rechnung und Experiment existieren.

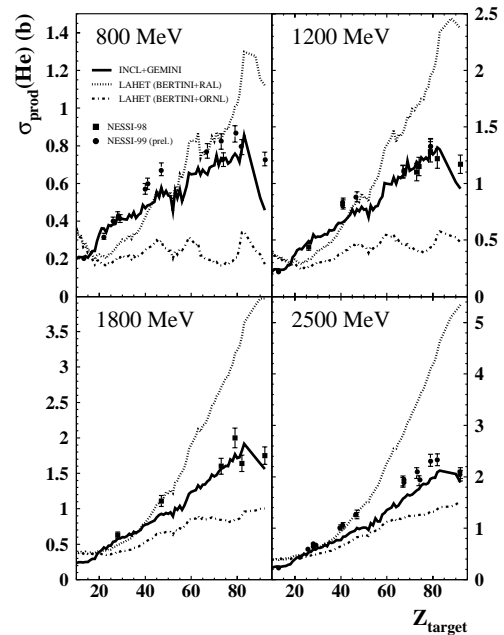


Abb. 4: Vergleich von gemessenen und gerechneten Helium Produktionsquerschnitten für einen großen Bereich von Targetkernen (Z_{target}) und Protonenenergien von 800 – 2500 MeV

Die 1999 gemessenen Produktionsquerschnitte von H und He in 0.8, 1.2 und 2.5 GeV protoneninduzierten Spallationsreaktionen an Targets von Aluminium bis Uran sind im wesentlichen auch ausgewertet. Die experimentellen Daten wurden im Detail mit den Ergebnissen von intranuklearen Kaskaden (INC) Rechnungen mit anschließender Verdampfung im Rahmen des statistischen Modells verglichen. Hierzu wurden zunächst die beiden Programmsysteme LAHET und INCL benutzt. Der LAHET code wurde bisher extensiv für die Abschätzung von Strahlenschäden und die Spezifikationen von Targetstationen für Spallationsneutronenquellen benutzt. Der INCL Code ist eine Kombination des INC-Code von Liege und dem Verdampfungscode GEMINI. Die experimentellen Daten für die Helium Produktion sind in Abb. 4 den Ergebnissen dieser Codes gegenübergestellt. Die LAHET Ergebnisse wurden mit (RAL) bzw. ohne (ORNL) Annahme von anregungsenergieabhängigen Coulombbarrieren im Verdampfungscode berechnet. Beide Optionen des LAHET Codes zeigen eine grosse Diskrepanz zu den experimentellen Ergebnissen. Der neuere INCL Code ist dagegen in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Ähnliche Ergebnisse wurden auch für die Produktionsquerschnitte von H beobachtet.

Da mit den beiden 4π -Zählern des NESSI-Detektors auch weitere Observable bestimmt werden können wie z.B. die Anregungsenergieverteilung in Spallationsreaktionen, konnten auch die Ursachen für die Diskrepanzen mit den experimentellen Daten aufgezeigt werden. Allerdings gibt es hier noch experimentelle Probleme bei der Untergrundbestimmung von peripheren Reaktionen. Dies soll in weiteren Experimenten geklärt werden. Ebenfalls sollen auch die Produktionsquerschnitte von einzelnen H- und He-Istopen sowie von Li, Be und B

bestimmt werden wie dies bisher nur für die Reaktion $p(2.5\text{ GeV}) + \text{Au}$ möglich war.

Neutronen können auch mit Hilfe der Fusionsreaktion $\text{D}(d,n)^3\text{He}$ durch Laserlicht erzeugt werden. Hiermit können im Prinzip extrem kurze intensive Neutronenpulse im Subpikosekundenbereich erzeugt werden und würden somit die zeitliche Untersuchung von Stoßkaskaden im Festkörper mit Hilfe von Puls-Probe Verfahren ermöglichen. Wir haben zusammen mit dem MBI-Berlin die D-d Reaktion zum Studium der Beschleunigungsfelder in laserinduzierten Plasmen in deuterierten Polyäthylen Targets untersucht. Die unter verschiedenen Winkeln relativ zum Laserstrahl gemessenen Neutronenenergiespektren (Abb.5) ermöglichen Aussagen über die Größe und Richtung der elektrischen Felder.

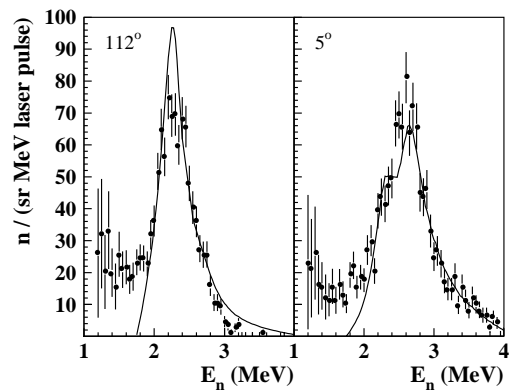


Abb. 5: Neutronenenergiespektren der laserinduzierten $\text{D}(d,n)$ Reaktion in festen Targets im Vergleich mit einer Simulation unter Annahme einer isotropen Beschleunigung der Deuteronen bis zu Energien von 1 MeV.

F. Mezei, D. Hilscher, U. Jahnke, V. Tishchenko. C.-M. Herbach

Kollektive Dynamik und Diffusion

Kollektive Dynamik in Materialien komplexer Struktur

Einsatz der Spektrometer für inelastische Neutronenstreuung zur Messung kollektiver Anregungen und Relaxationen, insbesondere zur Aufklärung folgender Phänomene:

- Natur des Übergangs in eine magnetische bzw. in eine strukturelle oder dynamische Ordnung unter dem Einfluß starker Unordnung (echte und vermutete Phasenübergänge).
- Martensitischer Phasenübergang (Einfluß einer magneto-elastischen Wechselwirkung).
- Aktuelle Fragen zum Verhalten von Elementaranregungen in kondensierter Materie.

Untersuchung der Dynamik in fehlgeordneten magnetischen Systemen

Im Berichtsjahr wurden die Untersuchungen der Spinglass Dynamik mit Neutronen-Spinecho (NSE) fortgesetzt. Das Spinglassystem $\text{Au}_{0.86}\text{Fe}_{0.14}$ wurde mit NSE am BENSC Spektrometer SPAN untersucht. Diese Messungen haben Ergebnisse ergänzt, die am ILL-HMI-FZJ Spektrometer IN15 erzielt wurden. Die Kombination beider Experimente erlaubt die Spindynamik in einem Fourierzeit-Bereich vom 4 Größenordnungen zwischen 3 ps und 30 ns zu untersuchen. Dadurch können eindeutige Aussagen zu theoretischen Erwartungen gemacht werden.

Oberhalb der Spinglastemperatur ($T > T_g$) kann die Spin Autokorrelationsfunktion $q(t)$ durch das Gesetz $q(t) = t^{-x} \exp(-t/t)^\beta$ beschrieben werden. Am T_g dagegen folgt $q(t)$ einem einfachen Potenzgesetz: $q(t) = t^{-x}$ mit $x=0.12$. Dieses steht in exzellenter Übereinstimmung mit Erwartungen aus Simulationen und mit Hilfe einer speziellen numerischen

Methode (finite size scaling) konnte auch gezeigt werden, daß der Exponent x mit den statischen und dynamischen kritischen Exponenten verbunden ist: $x = (d - 2 + \eta)/2z$. Die Exponentenwerte, die für Systeme wie $\text{Au}_{0.86}\text{Fe}_{0.14}$ mit Hilfe von Suszeptibilitätsmessungen ermittelt wurden, ergeben $x=0.12$, ebenso wie die NSE Daten. Diese Ergebnisse sind die erste direkte Bestätigung der theoretisch vorhergesagten kritischen Dynamik von Spingläsern. Der Vergleich der Ergebnisse, die mit Hilfe von NSE, μSR and ac Suszeptibilität an ähnlichen Systemen ermittelt wurden, zeigt, daß sich das kritische Verhalten über einen besonders breiten dynamischen Bereich von Picosekunden bis zu Sekunden ausdehnt, d.h. von der mikroskopischen bis zur makroskopischen Zeitskala.

Die Dynamik des Ising Spinglassystems Fe_xTiS_2 wurde an den NSE Spektrometern SPAN und IN15 weiter untersucht. Die Ergebnisse bestätigen die allerersten NSE Messungen an einem Ising Spinglassystem, die 1999 am SPAN durchgeführt wurden und eine quantitative Analyse der Dynamik ermöglicht haben. Die Dynamik des Ising Spinglassystems unterscheidet sich stark von der Dynamik der Heisenberg Systeme. In dem Ising System ist die Dynamik sehr langsam und bei der Glastemperatur (T_g) fast vollständig eingefroren, wie durch folgenden Vergleich illustriert wird: Analog zu dem vermuteten Heisenberg System $\text{Au}_{0.86}\text{Fe}_{0.14}$, konnte die Spin Autokorrelationsfunktion $q(t)$ von Fe_xTiS_2 bei T_g durch ein einfaches Potenzgesetz beschrieben werden: $q(t) = t^{-x}$.

Der Exponent beträgt jedoch $x \approx 0.005$ und ist damit mehr als zwanzigmal kleiner als der Exponent des Heisenberg Systems. Diese Ergebnisse sind in Einklang mit μSR Messungen, die an denselben Proben durchgeführt wurden.

Dynamische Prozesse beim Glasübergang

Im vergangenen Jahr gelang uns erstmals, die Natur schneller Relaxationsprozesse am Glasübergang in einem Glassystem der sogenannten fragilen Klasse zu erkennen. Ziel der Arbeiten im Berichtsjahr war es, die Untersuchungen auf andere Typen von Gläsern zu erweitern, insbesondere auf starke Gläser, für die ZnCl_2 ein typischer Vertreter ist. Gläser dieser Klasse sind dadurch charakterisiert, daß eine stark vernetzte Struktur sowohl in der Glasphase, wie auch in der unterkühlten Flüssigphase beibehalten wird. Die ersten Ergebnisse haben zu der neuen Erkenntnis geführt, daß die Stärke der schnellen Relaxationsprozesse viel kleiner ist, als in fragilen Gläsern. Diese Beobachtung widerspricht der landläufigen theoretischen Annahme über die Verknüpfung schneller Relaxationsprozesse und des sogenannten Boson Peaks.

Die inkohärente Dynamik von ataktischem Polypropylen (aPP) wurde mit Hilfe inelastischer Neutronenstreuung an den Spektrometern IN10 (ILL), IRIS (ISIS) und NEAT (BENSC) untersucht. Die Ergebnisse haben zu einer vollständigen Charakterisierung a) der Seitengruppen-Relaxation unterhalb des Glasübergangs und b) der Segment-Relaxation in der flüssigen Phase, also oberhalb des Glasübergangs geführt.

Die Relaxation der Seitengruppen in der Glasphase folgt einem Arrhenius Gesetz ist aber nicht exponentiell. Die Daten weisen auf einer Distribution von Rotations-Relaxationsraten hin, dessen Breite mit zunehmender Temperatur zunimmt.

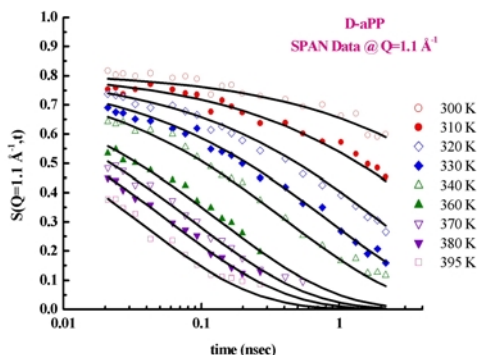


Abb. 6 : NSE Spektren vom deuterierten ataktischen Polypropylen (aPP) gemessen bei $Q = 1.1 \text{ \AA}^{-1}$, dem ersten Maximum des statischen Strukturfaktors $S(Q)$.

Die Relaxation oberhalb des Glasübergangs wurde durch eine Kohlrauschfunktion (stretched exponential) beschrieben. Die Temperaturabhängigkeit und die Form der Relaxation stimmen sehr gut mit Ergebnissen von Berechnungen der Molekulardynamik überein.

Die kohärente Dynamik von flüssigem aPP wurde an einer vollständig deuterierten Probe am Neutronen-Spin-Echo-Spektrometer SPAN (BENSC) untersucht. Die Spektren wurden oberhalb des Glasübergangs ($T_g = 237 \text{ K}$) aufgenommen und zeigen einen nicht-exponentiellen Abfall, der durch eine Kohlrauschfunktion (stretched exponential) beschrieben wird. Die Relaxation wird deutlich langsamer, wenn die Temperatur sich der Glastemperatur annähert (Abb.6) und diese Temperaturab-

hängigkeit skaliert mit der makroskopischen Viskosität.

Die NSE Spektren wurden durch TOF Messungen mit Polarisationsanalyse, die auch am SPAN durchgeführt worden sind, ergänzt. Dadurch konnte die Dynamik von aPP über einen dynamischen Bereich von 5 Größenordnungen untersucht werden. Die Meßdaten werden zur Zeit noch ausgewertet. Vorläufige Ergebnisse weisen auf der Existenz eines dynamischen Prozesses im psec Zeitbereich hin, der schneller ist, als die klassische Relaxation (s. Abb. 6).

Die Dynamik von Polyethylenoxid (PEO)-Salz Mischungen wurde mit Hilfe inelastischer Neutronenstreuung am Spektrometer NEAT (BENSC) untersucht. Damit konnte erstmals mit Hilfe von Neutronen nachgewiesen werden, daß ein zusätzlicher dynamischer Prozess auftritt sobald Salz reinem Polymer hinzugefügt wird. Diese Ergebnisse stimmen mit Modellrechnungen zur molkularen Dynamik überein, die auf die Existenz von zwei unterschiedlichen Mikrodomänen aus PEO Komplexen mit Salz und aus reinem PEO hingewiesen haben.

Lebensdauer von Phononen in anharmonischen Festkörpern

Abgesehen von einigen Ausnahmefällen erlaubt die Auflösung konventioneller Neutronenspektrometer es nicht, die Lebensdauer und damit auch die Wechselwirkungen elementarer Anregungen zu untersuchen. Dieses wurde jetzt durch Kombination einer Variante des Neutronen-Spin-Echo-Verfahrens, der NRSE-Methode und Dreiachsenspektroskopie möglich.

Am kalten Dreiachsenspektrometer V2 (FLEX) wird bei Verwendung der NRSE-Option eine Steigerung der Energieauflösung um mehr als eine Größenordnung erreicht. Unter dem Stichwort "Phononenfokussierung" wurden die grundlegenden Ideen zu dieser Methode bereits Mitte der siebziger Jahre formuliert, aber erst die in den vergangenen Jahren in Zusammenarbeit zwischen dem HMI und der TU-München entwickelte NRSE-Technik ermöglichte, die Methode der Phononenfokussierung für disperse Anregungen erstmals und bisher weltweit einzigartig bei BENSC experimentell zu realisieren. Die instrumentelle Entwicklung ist bereits soweit vorangeschritten, daß es jetzt gilt, mit dem zuverlässig arbeitenden NRSE-Gerät weitere physikalische Fragestellungen aus dem Bereich der elementaren, dispersiven Anregungen zu bearbeiten. BENSC bietet die NRSE-Option nunmehr im regulären Nutzerbetrieb auch externen Gästen an.

Jüngste Untersuchungen mit dem spinechoerweiterten Spektrometer konzentrierten sich auf Lebensdauern von Phononen in Blei. Diesem Klassiker der Phononenspektroskopie gilt seit kurzem wieder aktuelles Interesse, da es inzwischen möglich ist, in ab-initio Rechnungen Lebensdauern von Phononen vorherzusagen. Blei ist von besonderem Interesse, da hier die Gitteranharmonizität und somit der (temperaturabhängige) Beitrag der Phonon-Phonon-Wechselwirkung zur Lebensdauer stark ausgeprägt ist. Bei transversal akustischen Phononen mit Wellenvektoren in $[\zeta\zeta 0]$ -Richtung konnte in einem ersten Experiment die Temperaturabhängigkeit der gemessenen Linienbreiten gezeigt werden. In diesem Fall zwingt die Steigung der

Dispersionskurve für die gewählten Anregungen Spin-Echo-Präzessionsfelder um 30° zu kippen. Klassische NSE-Spektrometer, die Solenoidspulen zur Erzeugung der Präzessionsfelder verwenden können diese Kippwinkel auch unter Einsatz von Korrekturspulen nicht erreichen.

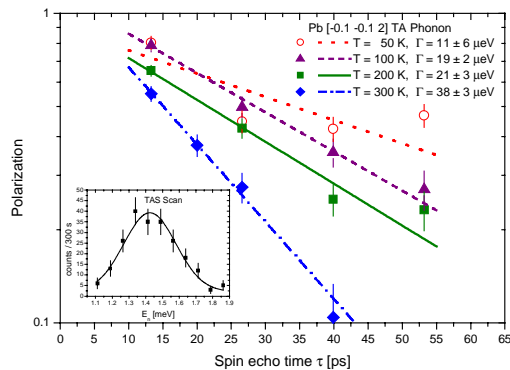


Abb. 7: Linienbreiten von TA Phononen in Pb für unterschiedliche Proben temperaturen. Die Daten der NRSE-Messung wurden mit einem Modell gefittet, das lineare Dispersion und Lorentzförmige Linien voraussetzt. Γ ist die HWHM der Lorentzlinien. Das Dreiachsenspektrometer ohne Spin-Echo-Aufsatz hat in diesem Fall eine Energieauflösung von $365 \mu\text{eV}$.

Martensitische Phasenübergang in Ni_2MnGa

Bei der martensitischen Transformation von der kubischen Austenit- zur tetragonalen Martensitphase werden Martensitvarianten unterschiedlicher Orientierung gebildet, die eine Bestimmung der Phonondispersion in der Martensitphase nicht zulassen. Es konnte nun erfolgreich nachgewiesen werden, daß (bedingt durch die magneto-elastische Wechselwirkung) das Anlegen eines ausreichend starken Magnetfelds (1,5 T) die Bildung von Varianten einer bestimmten Orientierung bevorzugt. Somit konnte erstmals die Phonondispersion in der Martensitphase dieses Systems gemessen werden. Besonders untersucht wurden transversal-akustische Phononen und ihre Temperaturabhängigkeit längs [110]- und [101]-Richtungen, die im vertikalen bzw. horizontalen Magnetfeld möglich waren. Während in [101]-Richtung keine Phononanomalie gefunden wurde, zeigte sich in [110]-Richtung eine ähnliche Anomalie, wie sie schon in der kubischen Austenitphase bei Annäherung an die Transformationstemperatur gefunden wurde.

F. Mezei, C. Pappas, M. Russina, O. Russina, G. Ehlers, I. Campbell, E. Hoinkis, P. Vorderwisch, K. Habicht, A. Triolo, G. Kali

Diffusion und Materialtransport in kondensierter Materie

Bei unseren Untersuchungen zur Aufklärung der Mechanismen von Diffusion und "Materialtransport" in anorganischen Ionenleitern, und zum Studium der funktionsrelevanten Dynamik in biologischen Makromolekülen wird neben der Neutronendiffraktion die Technik der quasielastischen Neutronenstreuung (QENS) eingesetzt. Diese Arbeiten sind beispielsweise von Bedeutung für Ionensensoren, Feststoffbatterien, Brennstoffzellen, Wasserstoffspeicher, sowie für das Verständnis der Funktionsweise von biologischen Membranen und Membranproteinen (z.B. "Protonenpumpen").

Die *in situ* SANS Methode zur Untersuchung der Adsorption und Kondensation von Gasen in porösen Festkörpern wurde zur Anwendung bei 78 K weiterentwickelt. Diese Methode gibt es weltweit bisher nur am HMI. Damit können nun auch die Modelle zum Status von Stickstoff in bestimmten porösen Stoffen überprüft werden. Die am häufigsten angewandten Standardmethoden zur Charakterisierung poröser Festkörper beruhen auf den Adsorptionsdaten von Stickstoff. Diese Fragestellungen sind wichtig für Adsorptionsmittel, Katalysatoren und Wasserstoffspeicher.

Mechanismen von schnellen Ionenleitern

Zur Interpretation der Experimente quasielastischer (QENS) und inelastischer inkohärenter Neutronenstreuung (IINS), ergänzt durch Fourier-Transform-Infrarot-Untersuchungen (Kooperation mit K. Langer, Inst. f. Angewandte Geowissenschaften I, TU Berlin), wurde ein neues theoretisches Modell entwickelt. Damit konnte der Mechanismus der mit der Ionenleitung verknüpften langreichweitigen Diffusions-Bewegung der Protonen im Kristallgitter von $\text{Rb}_3\text{H}(\text{SeO}_4)_2$ im Detail aufgeklärt werden. Entscheidend für den Erfolg der Untersuchung war der in den Experimenten zur Verfügung stehende große Energiebereich (1 μeV bis 100 meV), sowie die verwendete variable Energieauflösung (5 μeV bis 1000 μeV).

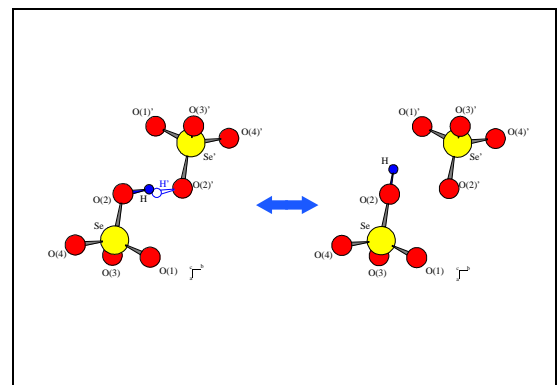


Abb. 8: Reaktionsgleichgewicht $[\text{H}(\text{SeO}_4)_2]^{2-} \Leftrightarrow [\text{SeO}_4]^{2-} + [\text{H}(\text{SeO}_4)]^{-}$

Es konnte gezeigt werden, daß die in der Hochtemperatur-Phase vorliegende dynamische Fehlordnung mit einer intrakristallinen chemischen Gleichgewichtsreaktion beschrieben werden kann. Sie besteht in einem ständigen Alternieren zwischen der Assoziation der beiden Monomere $[\text{HSeO}_4]^{-}$

und $[\text{SeO}_4]^{2-}$ zu dem Dimer $[\text{H}(\text{SeO}_4)_2]^{3-}$ (Bildung einer Wasserstoffbrücke) und der Dissoziation des letzteren in die beiden Monomere (Aufbrechen der Wasserstoffbrücke); s. die schematische Darstellung des Reaktionsgleichgewichts in der Abb. 8.

Die Untersuchung des Zusammenhangs zwischen den Rotationsbewegungen anionischer Moleküleinheiten und der Diffusion alkalischer Kationen wurde von Na_3PO_4 auf Li_2SO_4 und LiNaSO_4 ausgedehnt. In der letztgenannten Verbindung wurden Hinweise auf die mögliche Existenz eines 'Schaufelradmechanismus' gefunden. (Kooperation mit D. Wilmer, K. Funke et al., Institut f. Physikal. Chemie u. SFB 458, Universität Münster)

Biomembranen und Membranproteine

Es wurde weiterhin an der Frage der Korrelation der biologischen Funktion von Bacteriorhodopsin mit den strukturellen und dynamischen Eigenschaften dieses Proteins gearbeitet. Ein erfolgversprechender Lösungsansatz, der auf einer differenzierteren Energieanalyse beruht, wird verfolgt. Im Zusammenhang mit dem Hydratisierungs- / Dehydratisierungs-Verhalten der Pupurmembran wurde ein verbessertes Modell der Dynamik des reinen Wassers entwickelt (Kooperation mit S. Longeville, LLB Saclay). Dieses wird dringend zur Beschreibung der Wasserkomponente in biologischen Systemen benötigt. Es wird zunächst auf die Beschreibung von Systemen biologisch relevanter mittelgroßer Moleküle (Cyclodextrine) in Wasserlösung angewandt.

Permethylierte Cyclodextrine (CD) haben einen negativen Löslichkeitskoeffizienten in Wasser, im Gegensatz zum (ganz normalen) Verhalten der nicht methylierten Cyclodextrine. Der negative Löslichkeitskoeffizient ist ein Beispiel für den hydrophoben Effects, welcher für biologische Makromoleküle von großer Bedeutung ist. Zur Untersuchung dieses Phänomens wurden quasielastische Neutronenstreuexperimente (NEAT / V3) an drei Verbindungen in Wasserlösung durchgeführt, und zwar an unmethyliertem γ -CD, per-dimethyliertem β -CD (DIMEB) und an per-trimethyliertem γ -CD (TRIMEG). Aus den Spektren sollen die Zeitkonstanten für Molekülrotation, Translationsdiffusion, sowie die Hydratisierungszahlen bestimmt werden. (Kooperation mit N. A. Dencher, Inst. f. Biochemie, TU Darmstadt und J. Fitter, IBI-2, Biologische Strukturforchung, FZ Jülich und W. Saenger, Institut f. Kristallographie, FU Berlin)

Transport und Adsorption von Gläsern in porösen Substanzen

Im Berichtszeitraum wurde die Adsorption und Kondensation von Stickstoff bei Temperaturen nahe 78 K in vier porösen Stoffen bestehend aus Silizium und Sauerstoff mit Porengrößen von ≈ 2.5 bis 5 nm mittels in situ Neutronenkleinwinkelstreuung (SANS) untersucht. Dabei wurde der Druck des Stickstoffs schrittweise erhöht und jeweils die Streukurve gemessen. Diese Stoffe waren: ein poröses SiO_2 - Glas in Form einer Scheibe von 2 mm Dicke und 5 mm Durchmesser („monolithische Probe“) mit einer mittleren Porengröße von ~ 7 nm sowie drei hochgeordnete pulverförmige synthetische Silicagele (TU Berlin und MPI Gollm).

Die Entwicklung der 3D-Modelle aus SANS Daten wurde erfolgreich weitergeführt und numerische Methoden zur Berechnung der inneren Oberflä-

chen, der mittleren Porengröße, der mittleren Wandstärke und der Segmentlängenverteilung aus SANS Daten entwickelt.

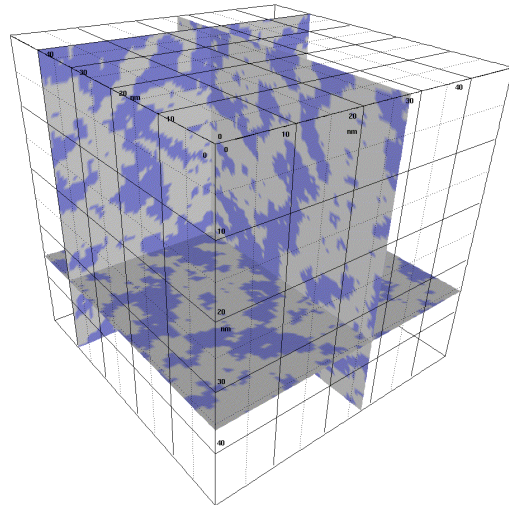


Abb. 9 Materialmodell Gelsil 50, Kantenlänge 50

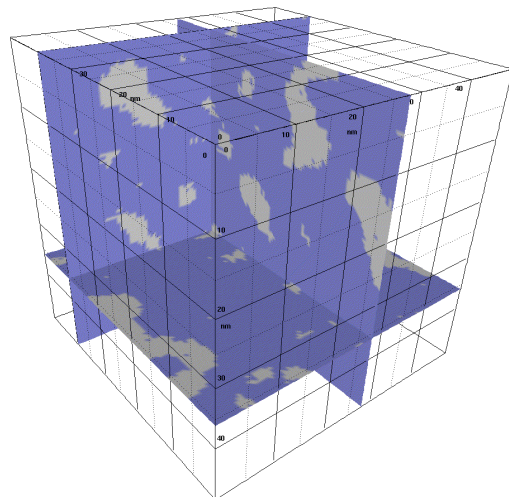


Abb. 10: Materialmodell Gelsil 50, die Hälfte des Porenvolumens ist mit N_2liq gefüllt (SiO_2 und N_2liq blau, Poren weiß).

Die Abbildungen zeigen ein Modell der Mikrostruktur von Gelsil 50 vor und nach der Füllung von ca. 50 % des Porenvolumens mit flüssigem Stickstoff. Da die Streulängendichte von SiO_2 und N_2liq annähernd gleich ist, „sehen“ Neutronen keinen Unterschied zwischen der festen und der flüssigen Phase.

F. Mezei, E. Hoinkis, F. Mädler (DV), N. Eschricht (DV), R.E. Lechner, A. Desmedt, J. Pieper

Überstrukturen und konkurrierende Wechselwirkungen

Konkurrierende Wechselwirkungen führen zu Überlagerungen von verschiedenen Strukturen auf verschiedenen Längenskalen in einer breiten Auswahl von Materialien, z.B. in komplexen Flüssigkeiten ebenso wie in den hoch geordneten Strukturen von Einkristallen. Dieses Feld schließt unter anderem die Untersuchung von Ordnungs- und Vorordnungsphänomenen in komplexen Flüssigkeiten an Fest/Flüssig-Grenzflächen ein. Neutronenreflexion eignet sich sehr gut für diese Studien, da die Methode auf einer molekularen Längenskala oberflächensensitiv ist und die ausgewählten festen Silizium-Substrate nur für Neutronen transparent sind.

Am HMI wurde eine hochempfindliche Methode zur präzisen Untersuchung von Einkristallen unter Anwendung von 396 kW Röntgenstrahlung unter Einbeziehung komplementärer Neutronenbeugung entwickelt. Mit Hilfe dieser Methode können elektronische Strukturen in magnetischen Materialien untersucht werden.

Die Neutronenreflexionsstudien zu den Adsorbatstrukturen eines Tensids, C₁₀E₄, an (h)-PS – und (h)-PMMA-Substraten wurden abgeschlossen. Dabei zeigte sich, dass an beiden untersuchten Substraten kondensierte Tensidmonolagen bereits unterhalb der cmc der Tensidlösungen ausgebildet werden. Stabile Adsorptionsschichten gleicher Dicke und gleicher Packungsdichte, aber unterschiedlichem Adhäsionsverhalten wurden gefunden oberhalb der cmc: An PS-Oberflächen adsorbiert C₁₀E₄ irreversibel, an PMMA-Oberflächen dagegen reversibel.

Erste Experimente wurden durchgeführt zur Erhöhung der Sensitivität der Neutronensonden auf die Streulängen-Dichtegradienten an den Polymer/Flüssig-Grenzflächen. Diese Experimente zeigten, dass das gesteckte Ziel durch den Einsatz deuterierter Substrate erreicht werden kann. Sie zeigten jedoch auch, dass die (d)-Polymer/Flüssig-Grenzflächen bereits vorab durch protonierte Substanzen kontaminiert waren. Die Ursache dieser Kontaminationen ist unklar. Sie muss aufgeklärt und in zukünftigen Experimenten vermieden werden.

Intensive Arbeiten wurden durchgeführt zur Präparation und Stabilität der als Substrate eingesetzten polymeren Filme auf Silizium-Einkristallen mittels Röntgenreflexion, Raster-Kraftmikroskopie und ortsaufgelöster Ellipsometrie. Das wichtigste Ergebnis dieser Untersuchungen ist, dass nach dem Schleuderverfahren (spin-coating) homogene Polymerbeschichtungen mit Dicken im Bereich von 10 – 90 nm über laterale Dimensionen von 50 mm X 80 mm reproduzierbar hergestellt werden können. Erhöhte Stabilität dieser Beschichtungen auf den Siliziumkristallen gegen wässrige Lösungen wird erreicht durch tempern oberhalb der Glasemperatur der Polymerfilme. Diese Arbeiten bilden die Grundlage für die temperaturabhängigen Untersuchungen an den ausgewählten Tensidsystemen, als auch der Untersuchungen an komplexeren adsorbierten Lipiddoppelschichten mit einfachen Peptiden und Proteinen.

Es wurden erste Experimente zur Enzymadsorption und Penetration in Lipid-Bischichten auf Polyelektrolyt-Unterlagen durchgeführt. Der erste Schritt war die Untersuchung des Quellverhaltens der Polyelektrolyten Schichten als Funktion des Molekulargewichts der Komponenten und der Probenpräparation. Dabei wurde festgestellt, dass als Funktion des Aufbaus, i.e. der Abfolge der Monolagen der polymeren Komponenten, zeitlich stabile Polyelektrolyt-Schichten als auch über Tage quellende Polymerschichten hergestellt werden können.

Im zweiten Schritt wurden Untersuchungen durchgeführt zur sukzessiven Adsorption von Lipid-Beschichten und Peptiden (β -Amyloid) auf den Polyelektrolyt-Schichten. Diese Experimente zeigten, dass Lipid-Bischichten auf den Polyelektrolytkissen aufgebaut werden können über Lipid-Vesikel in Pufferlösung. An die so präparierten, polymergestützten Lipidschichten adsorbierte das ausgewählte β -Amyloid als stark wasserhaltige Monolage. Zusätzliche Methoden (CD und IR) wurden benutzt um Information über die Konformation der Peptide zu erhalten. Es zeigte sich, dass das β -Amyloid unter den hier eingestellten Randbedingungen in seiner β -Faltblattstruktur vorlag.

Elektronische Strukturen und feine Kristallverzerrungen

Mit der am HMI etablierten Methode der Gamma-beugung können elektronische Strukturparameter mit einer Genauigkeit bis zu 0.1% bestimmt werden, was mit Synchrotronstrahlung derzeit nicht möglich ist. Der auf methodischen Vorteilen basierende hohe Genauigkeitsstandard wird vor allem eingesetzt zur experimentellen Bestimmung der Elektronendichteverteilung in prototypischen Antiferromagneten. Präzisionsmessungen von Debye-Waller Faktoren ermöglichten den direkten Nachweis erhöhter Nullpunktsschwingungen in SrTiO₃, die den ferroelektrischen Übergang unterdrücken.

Der Mott-Isolator CoO wurde eingehend untersucht (Gammabeugung am Einkristall, Röntgen-, Neutronenbeugung am Pulver). Dabei ergab die Ladungsdichte für die paramagnetische Phase eine Verteilung der 3d-Elektronen auf ein Dublett und ein Triplett, die der Erwartung für perfekte Oktaedersymmetrie des Kristallfelds entspricht. Anhand von ESRF-Pulveruntersuchungen konnte die seit langem kontrovers diskutierte kristallographische Symmetrie von CoO geklärt werden: der magnetische Phasenübergang bei 290 K ist mit einer Symmetrierniedrigung vom kubischen NaCl-Typ nach monoklin verknüpft, wobei ein Achsenwinkel der deformierten flächenzentrierten Elementarzelle um maximal 0.04° von 90° abweicht. Die Kenntnis dieser geringen Verzerrung erlaubt die eindeutige Bestimmung der magnetischen Struktur bereits aus einem Neutronen-Pulverdiagramm. Die Untersuchung von MnO und NiO ist in Planung. Die Arbeiten zur Elektronendichte sollen auf Systeme mit Metall-Isolator Übergang ausgedehnt werden.

F. Mezei, G. Findenegg (TUB), H. Möhwald (MPI-KGF Golm), R. Steitz, I. Estrela-Lopez, J. Howse, W. Jauch, R. Reehuis