

**Abteilung**

**SF5 Theoretische Physik**



Die Abteilung Theoretische Physik beschäftigt sich mit grundlegenden Fragestellungen der Strukturforschung, zum Teil auch im Hinblick auf Anwendungen in der Photovoltaik.

Besondere Fortschritte waren zu verzeichnen auf dem Gebiet der magnetischen Systeme mit reduzierter Dimension. Insbesondere in dünnen ferromagnetischen Filmen und Multilagensystemen gelang es, eine signifikante Verbesserung in der Beschreibung der feldinduzierten magnetischen Reorientierung gegenüber der üblicherweise benutzten Theorie zu erzielen. Die Theorie wurde auf mehrere Filmlagen und auf Multischichtsysteme erweitert. Weiterhin wurde ein erheblicher Einfluss der Zwischenschicht-Austauschkopplung und der zweidimensionalen magnetischen Fluktuationen auf das Temperaturverhalten der magnetischen Eigenschaften festgestellt.

Fortschritte wurden ebenfalls erzielt auf dem Gebiet der mikrokanonischen Thermodynamik, in welcher die grundlegenden physikalischen Erhaltungssätze berücksichtigt werden. Durch die Untersuchung spezieller realistischer Systeme sowie einfacher Modelle erhält man eine tiefere Einsicht in die Natur der Phasenübergänge und der multikritischen Punkte.

Auf dem Gebiet der relativistischen atomaren Stöße wurde vor allem der Ladungstransfer und die Elektron-Positron-Paarerzeugung berechnet. Weiterhin wurde in enger Zusammenarbeit mit der GSI Darmstadt der radiative Elektronentransfer und der Photoeffekt für Systeme mit hoher Kernladungszahl  $Z$  untersucht und vor allem eine detaillierte Abschätzung quantenelektrodynamischer Korrekturen durchgeführt, die in der Zukunft messbar werden könnten.

Innerhalb der Halbleiterttheorie wurde der Ladungsträgertransport durch Korngrenzen in polykristallinen Materialien hindurch vor allem im Hinblick auf Anwendungen in der Photovoltaik untersucht, d.h. auch in Abhängigkeit von der Beleuchtung. Weiterhin wurde ein theoretisches Verständnis von Verspannungen erzielt, die beim epitaktischen Aufwachsen von Substanzen auf maskenbedeckte Substrate entstehen.

## Magnetische Systeme, Thermodynamik und atomare Stöße

### Magnetische Systeme reduzierter Dimension

*Untersuchung magnetischer Eigenschaften von dünnen ferromagnetischen Filmen, Multilagensystemen und Clustern, insbesondere unter Berücksichtigung von kollektiven Anregungen (Spinwellen).*

Die Arbeiten zur Reorientierung der Magnetisierung an dünnen ferromagnetischen Filmen mit Hilfe der Vielteilchen-Greenschen-Funktionen wurden fortgesetzt. Dabei wurden frühere Arbeiten [1,2], die sich mit Monolagen und Spin  $S = 1$  beschäftigten, dadurch erweitert, dass die Dipolkopplung mitgenommen wurde, und Spin  $S > 1$  und Multilagengestaltungen behandelt wurden [3]. Der Hamiltonoperator des Modells besteht aus einer isotropen Heisenberg-Austauschwechselwirkung, einer Einzel-ionenanisotropie zweiter Ordnung, der magnetischen Dipolkopplung und einem externen Magnetfeld. Wie zuvor [1,2] wurde die random phase approximation (RPA) für die Austauschwechselwirkung und die Anderson-Callen-Entkopplung für die Anisotropie Terme verwendet. Die Dipolkopplung wurde in meanfield-Näherung behandelt, von der gezeigt wurde, dass sie für kleine Kopplungskonstanten eine gute Näherung ist [3]. Da sich herausstellt, dass  $N$  Eigenwerte ( $N$  ist die Anzahl der Filmlagen) der  $3N \times 3N$  unsymmetrischen Matrix der Bewegungsgleichungen Null werden, müssen Kommutator und Antikommutator Greensche Funktionen verwendet werden. Dann erhält man die thermischen Erwartungswerte durch Anwendung des entsprechenden Spektraltheorems. Das gibt noch keinen vollständigen Satz von Bestimmungsgleichungen, sondern man muss zusätzliche Gleichungen aus der Bedingung herleiten, dass die Kommutator-Greenschen-Funktionen am Ursprung regulär sind. Es stellt sich heraus, dass

man für einen bestimmten Spin  $S$  insgesamt  $2S \times N$  gekoppelte Integralgleichungen selbstkonsistent lösen muss. Dies wird mit einem Gradientenverfahren erreicht, bei dem man die Lösungen im Raum der relevanten Variablen verfolgt. Durch ein neues Verfahren, das die Eigenwerte und Eigenvektoren der nichtsymmetrischen Bewegungsgleichungsmatrix benutzt, werden die entsprechenden Erwartungswerte berechnet. Aus diesen können dann der Orientierungswinkel  $\Theta(T, N)$  der Magnetisierung und die effektive Anisotropie  $K_2(T, N)$  als Funktionen der Temperatur und der Anzahl der Lagen des Films berechnet werden

In der Abbildung zeigen wir als Beispiel die Magnetisierung für Filme mit  $N$  Lagen für Spin  $S = 1$ .

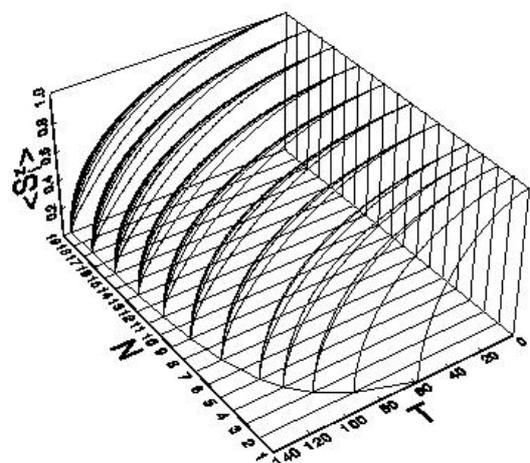


Abb 1: z-Komponente der Magnetisierungen der Unterlagen  $\langle S_z^z \rangle$  für Filme mit  $N$  ( $1, \dots, 19$ ) Lagen und Spin=1 als Funktion der Temperatur.

- [1] Ecker, A.; Fröbrich, P.; Jensen, P.J.; Kuntz, P.J., J. Phys., Condens. Matter **11** (1999) 1557  
 [2] Fröbrich, P.; Jensen, P.J.; Kuntz, P.J., Eur. Phys. J. B **13** (2000) 477  
 [3] Fröbrich, P.; Jensen, P.J.; Kuntz, P.J.; and Ecker, A., Eur. Phys. J. B **18** (2000) 579

P. Fröbrich, A. Ecker, P.J. Kuntz, P.J. Jensen

## Mikrokanonische Thermodynamik

*Mikrokanonische Beschreibung von Phasenübergängen in "kleinen" Systemen wie Kernen, Clustern und astrophysikalischen Systemen.*

Boltzmann und Gibbs haben der Thermodynamik mit der statistischen Mechanik eine mikroskopische Grundlage gegeben. Seither wird immer angenommen, dass dies nur für große homogene Systeme (im thermodynamischen Limes) gilt. Jedoch gehören viele Systeme in der Natur, darunter die größten, nicht dazu. Die interessantesten Erscheinungen der Thermodynamik, die Phasenübergänge, beschreiben inhomogene Systeme. Alle diese Systeme sind nicht-extensiv und die konventionelle kanonische Thermodynamik mit dem thermodynamischen Limes kann man ohne Vorsicht nicht anwenden.

Boltzmann's Prinzip  $S=k \ln W$  gibt die fundamentale mikrokanonische Definition der Entropie und damit der Thermodynamik. Hier braucht man weder den thermodynamischen Limes, noch Extensivität, noch Homogenität des Systems. Wir haben nun in unserer bisherigen Arbeit gezeigt, dass dieses Prinzip alle Phänomene der Phasenübergänge für kleine Systeme zeigt. Das steht im Gegensatz zu den meisten Lehrbüchern der Statistischen Mechanik. Angewandt auf „Kleine“ Systeme erlaubt das Prinzip sogar die Oberflächenspannung der Phasengrenzfläche automatisch zu bestimmen! Dies ist eine der schwierigsten Größen der konventionellen Statistik. Das Prinzip kann man auch auf selbstgravitierende kosmische Systeme anwenden. Heiße Kerne oder kleine Atomcluster zeigen den neuartigen Zerfall der Multifragmentation. Im Gegensatz zum bekannten Flüssig-Gas-Übergang neutraler makroskopischer Systeme zerfällt hier das Gesamtsystem in mehrere größere Tropfen. Das Beispiel zeigt, dass unsere neue Formulierung der Gleichgewichtsstatistik viele neue und überraschende Eigenschaften hat, die der konventionellen (Gibbs-) Thermodynamik fremd sind.

Ende des vergangenen Jahres haben wir uns mit der Nichtgleichgewichts-Statistik und dem Zweiten Hauptsatz beschäftigt. Das Boltzmann'sche Prinzip gestattet einen Beweis des Zweiten Hauptsatzes ohne Bemühung eines - willkürlichen - „coarse graining“. Die Irreversibilität hat ihre tiefe Ursache in der unvollständigen Information einer makroskopischen Theorie wie der Thermodynamik. Damit konnte der berühmte Loschmid'sche Wiederkehrinwand und das Zermelo'sche Paradoxon auf eine Fehlinterpretation der statistischen Mechanik zurückgeführt werden. Unser Formalismus wird zur Zeit von mehreren internationalen Experten der Nichtgleichgewichts-Thermodynamik sehr diskutiert, siehe z.B.

die kürzlich erschienene Arbeit von L. Ispolatov und E.G.D. Cohen in cond-mat/0101311.

D. Groß, E. Votyakov

## Atomare Stöße

*Theoretische Arbeiten zur radiativen Rekombination und zum photoelektrischen Effekt in starken Feldern. Elektron-Positron-Paarerzeugung in relativistischen atomaren Stößen.*

In Zusammenarbeit mit der GSI Darmstadt wurde im Berichtsjahr die Photoionisation von wasserstoffartigem Uran nahe der Schwelle untersucht, indem der zeitumgekehrte Prozess der radiativen Rekombination analysiert wurde. Die von uns theoretisch vorhergesagten (relativistisch hervorgerufenen) magnetischen Spin-Umklappprozesse konnten experimentell bei Vorwärtswinkeln eindeutig identifiziert werden, sogar noch bei der geringen Photoelektronen-Energie von 48 keV [1].

Innerhalb einer exakten relativistischen Beschreibung wurden winkeldifferentielle Wirkungsquerschnitte für radiative Rekombination und Photoionisation in den K-, L- und M-Schalen von Einelektron-Systemen mit hoher Genauigkeit (drei signifikante Stellen) berechnet. Für repräsentative Ladungen von  $Z=18, 36, 54, 66, 79$  und  $92$  und Elektronenenergien von  $1.0$  keV bis  $1.5$  MeV wurden die differentiellen Wirkungsquerschnitte tabelliert und in einer großen Anzahl von Diagrammen systematisch dargestellt. Durch Bereitstellung dieser Daten in *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, teils in elektrischer Form, wird eine empfindliche Lücke gefüllt werden.

Da die differentiellen Wirkungsquerschnitte für radiative Rekombination mit hoher Genauigkeit berechnet werden können, ist es sinnvoll, die zugehörigen QED-Korrekturen zu berücksichtigen. Dabei wurden die Ultraviolett- und Infrarot-Divergenzen analysiert. Der Beitrag von QED-Korrekturen zu den Winkelverteilungen wurde für Projektilenergien von  $100, 300$  und  $1000$  GeV/u  $U^{92+}$  Ionen berechnet. Die Abweichungen sind von der Ordnung von  $1\%$  und sollten in Zukunft messbar werden [2]. Darüber hinaus wurde der Effekt von Elektron-Elektron-Wechselwirkungen auf die radiative Rekombination in schweren heliumartigen Ionen berechnet und mit den üblichen Näherungen durch eine effektive Kernladung und eine Abschirmfunktion verglichen [3].

Innerhalb des Gebiets Elektron-Positron-Paarerzeugung und Ladungstransfer in relativistischen Atom-Ion Stößen wurden numerische Berechnungen mit der Methode der gekoppelten Kanäle durchgeführt. Diese führten zu einer ersten systematischen Untersuchung der Verletzung der Lorentz-Invarianz in relativistischen Zwei-Zentren-Rechnungen. Weiterhin wurde die Ladungszahl-Abhängigkeit beim Ladungstransfer in schweren Stoßsystemen untersucht, und es wurde ein bemerkenswerter Unterschied dieser Abhängigkeit im Vergleich zur bisher ausschließlich bekannten Störungstheorie bemerkt. Schließlich gaben Rechnungen zur Paarerzeugung, die wegen des enormen Rechenzeitbedarfs nur auf Workstation-Clustern

oder massiv parallelen Prozessorsystemen durchgeführt werden konnten, einen deutlichen Hinweis auf die Notwendigkeit einer Zwei-Zentren-Beschreibung des Kontinuums, die im Rahmen dieses Projekts nichtstörungstheoretisch erstmals umgesetzt wurde.

[1] Stöhlker et al., Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 983-6

[2] Shabaev et al.; Phys. Rev. **A61** (2000) 052112 1-12

[3] Yerokhin et al., Phys. Rev **A62** (2000) 042712 1-9

J. Eichler, T. Brunne

## Halbleiterphysik und Photovoltaik

*Theoretische Arbeiten zum Ladungsträgertransport in Halbleitern und zur epitaktischen Abscheidung von Halbleiterschichten, insbesondere im Hinblick auf photovoltaische Anwendungen.*

Im Rahmen des früher entwickelten einheitlichen Modells zur Beschreibung des Ladungsträgertransports in poly- und mikrokristallinen Halbleitermaterialien wurden Untersuchungen zum Einfluss von Größe und Zahl der Körner sowie von Beleuchtung auf die Transporteigenschaften photovoltaischer Materialien durchgeführt. Die elektronische Struktur der Korngrenzen wird dabei durch das Trapping-Modell beschrieben. Der Einfluss von Beleuchtung wird in der Näherung flacher Quasi-Fermi-Niveaus für Elektronen und Löcher berücksichtigt. Für die Aufspaltung  $\Delta E_F$  dieser Niveaus wird ein Wert gewählt, der mit der Träger-Erzeugungsrate in SOI-Solarzellen bei AM1.5-Beleuchtung konsistent ist. In Abbildung 1 werden Dunkelleitfähigkeit und Photoleitfähigkeit von n-dotierten pc-Si-Proben, bestehend aus einem Korn bzw. 100 identischen Körnern, miteinander verglichen; insbesondere zeigt sich dabei bei kleinen Donorkonzentrationen eine erhebliche Abhängigkeit der Leitfähigkeiten von der Körnerzahl.

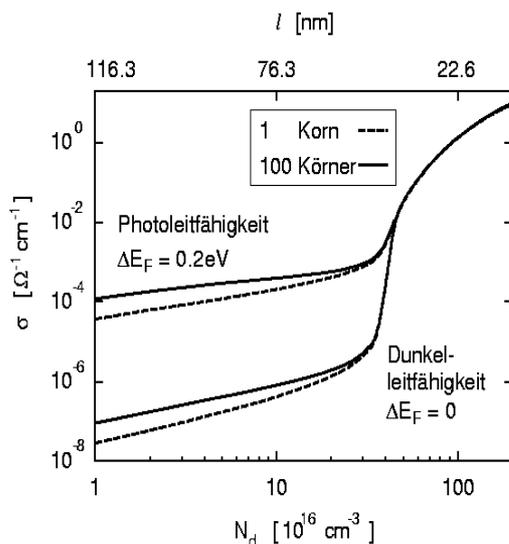


Abb.1: Dunkelleitfähigkeit und Photoleitfähigkeit von n-dotiertem pc-Si als Funktion der Donorkonzentration  $N_d$  und der mittleren freien Weglänge  $l$  für ein Korn bzw. eine Kette von 100 Körnern (Kornlänge: 50 nm; Dichte der Trap-Zustände:  $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ; Temperatur: 300 K).

Die geplanten Rechnungen zum Gasphasentransport im CSVT-Reaktor in der Abteilung Heterogene Materialsysteme (SE2) sind ins Stocken geraten, da sich im Design durch den Industriepartner Verzögerungen ergeben haben; die Geometrie wird erst im Frühjahr 2001 festgelegt. An Stelle dessen wurden die Kenntnisse im Umgang mit dem kommerziellen CFD-Programmpaket gepflegt durch unterstützende Rechnungen für die Abteilung Solare Energetik (SE5). Es wurden verschiedene Modelle für den Wassertransport in einem Baum erprobt und bestimmt, wie sich die Temperatur im Bereich um eine Heiznadel im Baumstamm verteilt, zum näheren Verständnis und zur Eichung entsprechender Messmethoden. Qualitativ gibt es aber mit plausiblen Annahmen über die Transportparameter des Baumes Abweichungen zum Experiment, deren Verständnis noch aussteht.

Zur Analyse von Verspannungen in GaN beim epitaktischen Aufwachsen auf maskenbedeckte Substrate („epitaxial lateral over-growth“) wurden im Rahmen der Kontinuumstheorie Rechnungen mit der Methode der finiten Elemente für verschiedene Kombinationen von Substraten und Masken durchgeführt. Beim Wachstum auf einem Saphir-Substrat, das mit einer Maske mit hexagonalen Öffnungen bedeckt ist, wachsen hexagonale Pyramiden durch die Öffnungen. Zur Beschreibung der Gitterfehlpassung zwischen GaN und Saphir wird ein effektiver Parameter eingeführt. Damit ergeben sich Verspannungsverteilungen, die sehr gut mit experimentellen Daten aus Mikro-Raman-Spektroskopie und Kathodolumineszenz übereinstimmen. Das Gleiche gilt für das Wachstum von GaN auf Saphir-Substraten mit einer Streifenmaske, wobei allerdings bei den Finite-Elemente-Simulationen Fäden mikroskopischer Leerstellen zwischen den GaN-Reihen berücksichtigt werden müssen.

U. Wille, W. Fritsch, Q. Liu, T. Weis



**Abteilung**

**SF6 Spurenelemente**



In dem Forschungsvorhaben werden Untersuchungen über biologisch wichtige Spurenelemente im menschlichen und tierischen Organismus durchgeführt. Die meisten Spurenelemente sind an Proteine gebunden und ihre biologischen Effekte sind die Wirkungen von Spurenelement-Protein-Komplexen. Durch Kombination von Mikrotechniken der Elementanalyse mit biochemischen und molekularbiologischen Methoden werden diese "Metalloproteine" identifiziert und ihre Eigenschaften, Strukturen und Funktionen aufgeklärt. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse sind für die verschiedenen Bereiche der Biowissenschaften von großem Interesse.

Die Studien sind interdisziplinär angelegt und erfordern den Einsatz hochentwickelter analytischer Verfahren. Im Rahmen von Serviceleistungen werden die Methoden Gästen zur Verfügung gestellt und Bestrahlungen und Analysen für auswärtige Institutionen durchgeführt. Dazu gehören auch als Service für die Krankenhäuser die Bestimmungen von Spurenelementen und Metalloproteinen für die Diagnose und Therapiekontrolle bei verschiedenen klinischen Fragestellungen.

Die Arbeiten werden in drei eng zusammenhängenden und aufeinander abgestimmten Projekten

- Analytik von Spurenelementen und Metalloproteinen
- Grundlagenforschung zur Untersuchung ausgewählter Metalloproteine
- Klinische Anwendungen

durchgeführt.

---

## Analyse von Spurenelementen und Metalloproteinen durch NAA und andere Methoden

---

*Analyse von Spurenelementen in biologischen Proben, dabei insbesondere Einsatz der NAA zur Multi-elementbestimmung und zur Qualitätskontrolle der anderen analytischen Verfahren;*

*Bestimmung von Metalloproteinen durch Kombination von Proteintrennverfahren mit Mikro-techniken der Elementanalytik*

Das analytische Instrumentarium der Abteilung umfasst die Neutronenaktivierungsanalyse (NAA), verschiedene Techniken der Atomabsorptionsspektrometrie (AAS) sowie die mit einem induktiv gekoppelten Plasma arbeitenden Verfahren der Atomemissions-spektrometrie (ICP-AES) und der Massenspektrometrie (ICP-MS). Eine weitere wichtige Analysenmethode ist die Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA) mit Hilfe der Synchrotronstrahlung bei BESSY II. Für die Identifizierung und Untersuchung von metallhaltigen Proteinen in Proteingemischen werden die elementanalytischen Methoden mit gelelektrophoretischen oder chromatographischen Verfahren zur Proteintrennung gekoppelt. Daneben werden bei der Untersuchung von Metalloproteinen auch radio-aktive Tracer mit hoher spezifischer Aktivität eingesetzt, die im Reaktor BER II hergestellt werden.

### Spurenelementanalytik

Betrieb der Bestrahlungseinrichtungen am BER II, der Gammaskpektrometer und des Aktiv-Labors für die Abteilung SF6 und Gäste.

Im Spektrum der Methoden zur Spurenelementbestimmung nimmt die NAA eine besondere Stellung ein. Betrieb und Weiterentwicklung der Bestrahlungseinrichtungen am BER II und der Messapparaturen für die NAA sind zentrale Aufgaben der Abteilung. Der Routinebetrieb bei der Probenbestrahlung und der Durchführung der NAA lief bis auf eine notwendige Reparatur an der drehbaren Bestrahlungsvorrichtung im Reflektor (DBVR) störungsfrei. Durch Verwendung eines extrem chlorar-

men Quarzmaterials für die Bestrahlungsampullen und den Einsatz einer Laserapparatur für deren Beschriftung konnten die Bestrahlungsverfahren weiter optimiert werden. Nach den Untersuchungen zum Berstverhalten der Quarzampullen bestehen jetzt keine Sicherheitsbedenken mehr gegen die Bestrahlung von fetthaltigen Proben.

Es wurden 296 Bestrahlungen durchgeführt, davon 219 (74 %) für 20 externe Nutzergruppen. 87 % der Bestrahlungen dienten neutronenaktivierungsanalytische Messungen. Bei der Multi-elementbestimmung in biologischen Materialien durch NAA nach Langzeitbestrahlung wurden insgesamt 1255 Einzelproben analysiert.

### *Methodische Arbeiten zur Multi-elementanalyse in sehr kleinen Probenmengen*

Blutproben von Neugeborenen und Säuglingen sind meist nicht größer als 100-250 µl. Für Multi-elementbestimmungen in derart kleinen Proben mit der ICP-MS und der ICP-AES muss ein spezieller Minizerstäuber eingesetzt werden. Für Routineanalysen benötigt man 150-250 µl der Probe, was 15 - 25 µl an unverdünnten Serum oder Erythrozyten-Lysat entspricht. Wichtig ist eine sehr sorgfältige Probenvorbereitung, da die Minizerstäuber leicht durch Schwebstoffe und Staubpartikel verstopfen können.

### *Entwicklung von Verfahren zur Bestimmung der Metall-Protein-Stöchiometrie von Metalloproteinen*

Durch die beachtlichen Fortschritte in der Proteinforschung und bei der Strukturaufklärung verschiedenster Metalloproteine besteht ein zunehmender Bedarf an einer präzisen Bestimmung der Metall-Protein-Stöchiometrie. Da die Proteine meistens nur in sehr kleinen Mengen gereinigt werden können, müssen spezielle Mikroverfahren entwickelt werden. Hierfür wurde die NAA und die AAS eingesetzt. Erste Erfolge bei der Analyse von Metalloenzymen sind bereits zu verzeichnen, so z.B. bei der Bestimmung von Molybdän und Wolfram in Dehydrogenasen (Zusammenarbeit mit dem Institut für Mik-

robiologie, Universität Marburg), der Bestimmung von Nickel in einer Nickelhydrogenase und der Kupfer- und Eisenkonzentration in einer NO-Reduktase (Zusammenarbeit mit dem Institut für Mikrobiologie der HU Berlin). Schwieriger war wegen der Kontaminationsgefahr bei der Probenpräparation die Bestimmung der molaren Magnesiumkonzentration in einer Arylsulfatase (Zusammenarbeit mit dem Institut für Kristallographie der FU Berlin).

#### *Umgang mit linksseitig gestutzten Datensätzen*

Bei Spurenanalysen in der Nähe der Nachweisgrenze des Bestimmungsverfahrens können innerhalb eines Kollektivs Proben vorkommen, bei denen die Gehalte unter der Bestimmungsgrenze liegen. Ziel der Arbeit ist die Entwicklung einer Strategie, wie man für solche lückenhaften Kollektive einen gemeinsamen Mittelwert mit einer gemeinsamen Streuung angeben kann. Es wurde gezeigt, dass es nicht zulässig ist, eine Mittelwertbildung unter Weglassen der fraglichen Werte durchzuführen oder die Nachweis- oder Bestimmungsgrenzen in die Berechnungen einzubeziehen. Selbst die häufig angewandte Praxis, für solche Werte die halbe Nachweisgrenze anzusetzen, kann unter bestimmten Umständen zu beachtlichen Trugschlüssen führen.

#### Speziationsanalytik

Bestimmung von Metallothioneinen in Gewebecytosolen

Metallothioneine sind niedermolekulare metallbindende Proteine, die im Organismus verschiedene Funktionen haben. Für ihre Bestimmung in Gewebecytosolen wurde ein Verfahren entwickelt, bei dem nach Homogenisation des Gewebes, Gewinnung des Cytosols durch Ultrazentrifugation und Abtrennung der hochmolekularen Proteine durch Ultrafiltration die niedermolekularen Proteine mit Hilfe chromatographischer Verfahren getrennt und die metallhaltigen Verbindungen im Eluat on-line mit Hilfe der ICP-AES oder ICP-MS identifiziert werden. Die Methode wurde sorgfältig validiert. Bei der quantitativen Bestimmung der unterschiedlichen Metallbeladung für die beiden Isoformen des Metallothioneins MT-1 und MT-2 aus humanen Leber-

cytosolproben wurde die Eignung des Verfahrens demonstriert.

#### *Verfahrensminiaturisierung für die Bestimmung von Metalloproteinen in Biopsieproben*

Für Untersuchungen an Biopsieproben stehen nur wenige mg des Probenmaterials zur Verfügung. Deshalb wurde das oben beschriebene Verfahren miniaturisiert. Dabei wurde auf die Vermeidung jeglicher Metallkontamination geachtet. Für die Cytosolgewinnung wurde die Probe im gleichen Gefäß homogenisiert und ultrazentrifugiert, für die chromatographische Trennung wurde eine SEC-Säule benutzt. Die Metalle im Eluat wurden mit der ICP-MS bestimmt. Das Verfahren wurde durch Bestimmung der Elemente S, Fe, Zn, Cu, Cd und Pb in einer 5 mg-Rinderleberprobe getestet.

#### *Analyse von metallhaltigen Proteinen durch Kombination von NAA und RFA mit gelelektrophoretischen Methoden*

Proteine eines Proteingemisches werden durch hochauflösende gelelektrophoretische Methoden getrennt und auf eine Membran überführt. Für die Elementbestimmung bei einem einzelnen Protein wird der die betreffende Proteinbande enthaltende Membranstreifen ausgeschnitten und mit Hilfe der NAA analysiert. Bei der Untersuchung der gesamten Proteine wird die Membran mit Synchrotronstrahlung gescannt und die Metallverteilung mit Hilfe der RFA gemessen. Die Untersuchungen zur Entwicklung und Optimierung der Verfahren wurden fortgesetzt. Bei der RFA wurden neben den Pilotstudien bei HASYLAB (Zusammenarbeit mit Prof. Knöchel, Universität Hamburg) mit ersten Untersuchungen bei BESSY II (Zusammenarbeit mit der BAM Berlin) begonnen.

D. Behne, D. Alber, P. Brätter\*, U. Rösick\*, C. Wolf, A. Richarz, M. Kühbacher

\* Im Laufe des Berichtsjahres aus dem Institut ausgeschieden

---

## Molekulare Spurenelementforschung: Seleno- und Metalloproteine

---

*Untersuchung von Selenoproteinen und ausgewählten Metalloproteinen im menschlichen und tierischen Organismus und Aufklärung ihrer Primärstruktur, Eigenschaften und Funktionen, insbesondere im Hinblick auf ihre Verwendung in der molekularen Medizin*

Die im Berichtsjahr durchgeführten Untersuchungen beschäftigten sich vor allem mit der Identifizierung und Charakterisierung von Selenoproteinen und der Aufklärung ihrer Primärstruktur und ihrer biologischen Funktionen. Durch Weiterentwicklung der Methoden konnten in den Geweben der Ratte mehr als 30 selenhaltige Proteine unterschieden werden. Erste Studien an tierischen und menschlichen Zellen zeigten, dass die im Organismus der Ratte gefundenen selenhaltigen Proteine auch in den

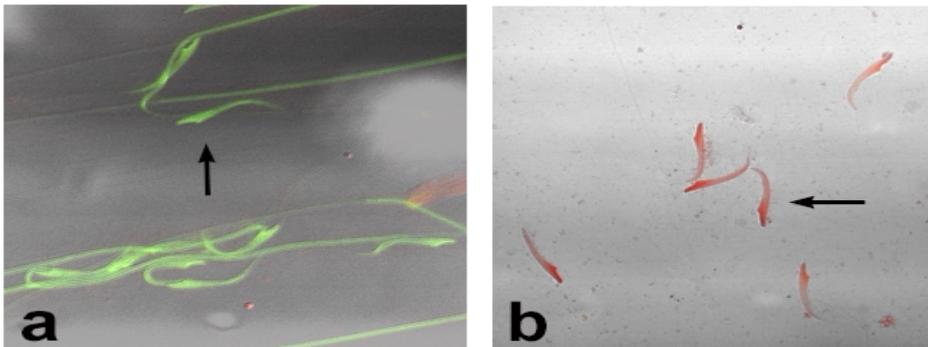
menschlichen Geweben vorhanden sind. Es wurde damit begonnen, die für die Selenoproteinforschung entwickelten Methoden für die Untersuchung anderer Metalloproteine zu modifizieren.

#### *Charakterisierung eines spermienpezifischen Selenoproteins*

In den Untersuchungen über ein von uns in früheren Arbeiten entdecktes Selenoprotein, das nur in den Spermien vorhanden ist, konnte jetzt dessen Funktion nachgewiesen werden. Durch Aufklärung seiner Primärstruktur wurde im Vorjahr gezeigt, dass es aufgrund von bestimmten Aminosäuresequenzen in der Lage ist, die Spermienkernmembran zu durchdringen und an die die Erbinformation enthaltende DNA zu binden. Während der Reifung der Spermien kommt es zu einem Umpacken und einer starken

Verdichtung der DNA und dadurch zu einer Umformung und Verkleinerung des Spermienkerns. Die Stabilisierung der verdichteten DNA wird durch bestimmte Proteine, die sogenannten Protamine, erreicht, die über S-S-Brücken miteinander verknüpft sind. Wir konnten zeigen, dass das neue Selenoenzym hier als eine Protaminthiol-Peroxidase wirksam ist, das bei den Protaminen die Oxidation der SH-Gruppen zu S-S-Brücken katalysiert und

damit eine wichtige Funktion bei dem Stabilisierungsprozess besitzt. In daraufhin bei Ratten durchgeführten Untersuchungen wurde gefunden, dass Selenmangel zu einer unvollständigen Kondensation der Spermienkerne und damit zur Unfruchtbarkeit führt (s. Abb. 1). Aufgrund dieses Zusammenhanges wurde mit klinischen Untersuchungen über die Rolle dieses Enzyms bei der männlichen Infertilität begonnen.



*Abb. 1: Effekt von Selenmangel auf die Spermienentwicklung*

Spermien von adäquat ernährten Ratten (a) und von Ratten mit Selenmangel (b) wurden mit Acridin-Orange gefärbt. Durch diese Färbemethode lassen sich unvollständig kondensierte Spermienkerne (rote Färbung) von normal kondensierten (grüne Färbung) unterscheiden. Fast alle Spermienkerne der Selenmangelratten zeigten eine zur Infertilität führende anomale Kondensation.

#### *Charakterisierung von 15 kDa-Selenoproteinen*

Bei einem Selenoprotein mit einer Molekülmasse von 15 kDa, das in der Prostata angereichert ist und eine Schutzfunktion bei der Entstehung des Prostatakarzinoms haben könnte, wurden weitere Arbeiten zur Entwicklung eines Immunoassays durchgeführt. Ziel dabei ist es, das Selenoprotein in menschlichen Prostataprobe zu messen. Diese Methode soll dann bei klinischen Untersuchungen bei Patienten mit Prostatakarzinomen eingesetzt werden.

Neben diesem Protein wurde ein 15 kDa-Selenoprotein im Gehirn gefunden, das andere Eigenschaften als das Prostataprotein besitzt und sehr wahrscheinlich ein weiteres neues Selenoprotein ist.

#### *Selenoproteine im zentralen Nervensystem*

Im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms "Selenoproteine" wurde mit der Untersuchung dieses Selenoproteins und anderer selenhaltiger Proteine im zentralen Nervensystem begonnen. Die ersten Ergebnisse zeigen, dass die Selenverbindungen unterschiedlich in den verschiedenen Bereichen des Gehirns verteilt sind.

#### *Strukturaufklärung von Selenoproteinen*

Im Hinblick auf die Bestimmung der dreidimensionalen Struktur des Prostata-Selenoproteins werden in Zusammenarbeit mit Prof. Heinemann, MDC Berlin, Kristallisationsversuche durchgeführt. Für die Gewinnung von dafür benötigten größeren Mengen des Selenoproteins wurde eine spezifische Affinitätsäule hergestellt, die immobilisierte Antikörper gegen das 15 kDa-Protein enthält. Ziel der augenblicklich laufenden Versuche ist die Produktion von mg-Mengen des Proteins.

#### *Untersuchung eines 18 kDa-Selenoproteins*

Die Untersuchungen über ein 18 kDa-Selenoprotein, das von uns in früheren Studien in den Mitochondrienmembranen mehrerer Gewebe entdeckt wurde, wurden fortgesetzt. Anhand der entschlüsselten Teilsequenz wurde ein aus 19 Aminosäuren bestehendes Peptid synthetisiert. Mit Hilfe dieses Peptids wurde ein Antikörper produziert, der in Proteinfractionen aus Leber, Niere, Gehirn und Herz spezifisch mit dem 18 kDa-Selenoprotein reagierte. Damit wurde ein weiterer Beweis erbracht, dass sich das 18 kDa-Protein von dem Selenoenzym Phospholipid-Hydroperoxid-Gluathionperoxidase (PHGPx) mit einer ähnlichen Molekülmasse von 20 kDa unterscheidet und ein bisher unbekanntes Selenoprotein ist.

#### *Nukleäre selenhaltige Proteine*

Bei der Untersuchung der Verteilung von Selen in den Zellkompartimenten wurden im Vorjahr in den Nierenkernen drei selenhaltige Proteine mit Molekülmassen im Bereich von 22 -25 kDa gefunden. Um sicherzustellen, dass es sich dabei nicht um bereits bekannte Selenoenzyme (zelluläre GPx, Plasma-GPx, PHGPx) handelt, wurden spezifische Antikörper gegen die zelluläre GPx und die PHGPx produziert und gereinigt. Sie zeigten keine immunchemische Reaktion mit den Nierenkern-Selenoproteinen. Für die endgültige Klärung der Frage, ob es sich um neue nukleäre Selenoproteine handelt, muss jedoch der Test mit einem zur Zeit produzierten Antikörper gegen die Plasma-GPx abgewartet werden.

*Bestimmung von neuen selenhaltigen Proteinen mit niedriger Molekülmasse in Geweben der Ratte*

Nach Markierung von Ratten in vivo mit  $^{75}\text{Se}$  und Trennung der Proteine von Leber, Niere, Herz und Gehirn mittels Tricin-SDS-PAGE wurden vier neue selenhaltige Proteine mit Molekülmassen von 7, 5, 4 und 3 kDa autoradiographisch nachgewiesen. Durch Aminosäureanalyse wurden das 7 kDa-Protein und das 5 kDa-Protein als selenocysteinhaltige Proteine identifiziert.

*Projekt im RiNA-Netzwerk "Produktion von Selenoproteinen in zellfreien Synthesystemen"*

Eine Möglichkeit zur Produktion von Proteinen ist der "Bioreaktor", der bis auf die mRNA die zur Biosynthese von Proteinen notwendigen Zellbestandteile enthält. Nach Zugabe der mRNA des interessierenden Proteins erfolgt dann dessen Synthese aus den Aminosäuren entsprechend dem in der mRNA festgelegten Code. Erste Versuche haben gezeigt, dass für die Produktion von Selenoproteinen die Transfer-RNA nicht optimal mit Selenocystein beladen werden kann. Deshalb wird augenblicklich zunächst dieser Schritt optimiert (Zusammenarbeit mit dem IBA Göttingen).

*Wechselwirkungen zwischen Fettsäuren- und Selenstoffwechsel*

Im Rahmen eines DFG-Projektes wurde in Zusammenarbeit mit Dr. Schäfer, Institut für Tierernährung der FU Berlin untersucht, ob eine erhöhte Aufnahme von ungesättigten Fettsäuren über die verstärkte Bildung von Peroxiden zu einer Erhöhung des Bedarfs an im antioxidativen Schutzsystem wirksamen Selenoenzymen führt. Die im Berichtsjahr erhaltenen Ergebnisse zeigen, dass durch diese Fettsäuren die Verteilung und die Wirkung der biologisch aktiven Selenoproteine beeinflusst werden.

A. Kyriakopoulos, D. Behne, H. Bertelsmann, H. Pfeifer, D. Röhlein

## Klinische Anwendung und epidemiologische Studien

*Die aus den anderen Projekten des Forschungsvorhabens gewonnenen Kenntnisse und Erfahrungen werden in Verbindung mit spezifischen spurenanalytischen Methoden in der klinischen Diagnostik von Spurenelementdefiziten und -belastungen, der Kontrolle von Therapiemaßnahmen und der Beurteilung von Ernährungsformen eingesetzt.*

*lytischen Methoden in der klinischen Diagnostik von Spurenelementdefiziten und -belastungen, der Kontrolle von Therapiemaßnahmen und der Beurteilung von Ernährungsformen eingesetzt.*

Jahr	Anzahl der Patienten	Anzahl der Analysen von Se bzw. Al	Serum-Selen <sup>1,2,3)</sup> Min/Max-Werte (µg/L)	Serum-Aluminium <sup>4)</sup> Min/Max-Werte (µg/L)
1997	22	91	36 - 142	2 - 39
1998	18	111	34 - 123	1 - 33
1999	21	153	44 - 117	1 - 76
2000	19	137	41 - 124	2 - 57

1) Referenzbereiche (95% Toleranzgrenzen) für Serum-Selen in der Berliner Bevölkerung : 27-58 µg/L für Neugeborene (1991) und 55-100µg/L für Erwachsene (1992 im HMI bestimmt und 1997 bestätigt)

2) Selenzufuhr für TPN-Patienten: 2µg/kg Körpergewicht für Neugeborene und 0.9µg/kg für Erwachsene,

3) Interventionsgrenzen für eine Selensubstitution: ab Serumsele <20µg/l bei Kindern und ab < 40µg/l bei Erwachsenen

4) No-effect-level für parenteral zugeführtes Aluminium bis heute nicht bekannt. Vorläufige Unbenklichkeitsschwelle nach Einschätzung der „European Dialysis and Transplant Association“: 50 µg Al/L im Serum-Aluminium

*Tabelle 1: Kontrollanalysen zur Beurteilung der Selenversorgung und der Aluminiumbelastung bei total parenteral ernährten Patienten*

### Kontrolle der Selenversorgung und Aluminiumbelastung bei langfristig total parenteral ernährten Patienten

Wie in den Jahren zuvor wurde bei langfristig total ernährten Patienten, die im Universitätsklinikum Benjamin Franklin stationär und ambulant betreut werden, Serumproben analysiert, um die Selenversorgung und die Aluminiumbelastung zu kontrollieren. Tabelle 1 gibt Aufschluß über das Probenaufkommen und zeigt an Hand der Analyseergebnisse, daß die Selenversorgung im zulässigen the-

rapeutischen Bereich liegt und daß eine Aluminiumvergiftung durch die parenterale Nahrungszufuhr nach dem heutigen Erkenntnisstand nicht zu befürchten ist.

Bestimmung der Aluminiumbelastung bei Ernährung aus All-in-one-Beuteln: Wie wichtig eine ständige Kontrolle ist, zeigte sich, als nach Umstellung der Ernährung auf sogenannte all-in-one-TPN-Beutel bei 13 Patienten stichprobenartig jeweils zwei Beutel auf Aluminium analysiert wurden. Dabei wurde festgestellt, daß die Nahrung für einen Patienten

nicht unerheblich mit Aluminium kontaminiert war (210 und 316 µg Al/L), während die Aluminiumkonzentrationen in allen anderen Beuteln mit Werten zwischen 17 und 43 µg Al/L deutlich geringer waren. Bestimmung der Aluminiumbelastung von parenteral ernährten Neugeborenen: Neu aufgenommen wurde die Überwachung der Aluminiumbelastung von parenteral ernährten Neugeborenen. Auch hier setzt sich bei den behandelnden Ärzten die Erkenntnis durch, daß für die Ernährung dieser Risikogruppe gezielt aluminiumfreie oder zumindest aluminiumarme Präparate eingesetzt werden sollen.

#### **Spurenelemente in der Säuglingsernährung**

Bei Frühgeborenen mit sehr niedrigem Geburtsgewicht verdoppelt sich ihre Körpermasse in wenigen Wochen. Wegen des hohen Bedarfs an Mineralien und Spurenelementen in dieser Phase kann es bei Unterversorgung zu einem Mangel mit zum Teil gravierenden Folgeschäden kommen. Es wird daher eine bedarfsangepaßte Supplementierung der Muttermilch angestrebt, um Wachstum, Knochenmineralisierung und Immunabwehr zu gewährleisten.

Bilanzstudien zur Versorgung von sehr untergewichtigen Frühgeborenen (ELBW) mit essentiellen Spurenelementen: Die Untersuchungen von ELBW-Kindern (Geburtsgewicht <1000g), die in Zusammenarbeit mit der Abteilung für Neonatologie der Charité Berlin durchgeführt wurden, sind inzwischen abgeschlossen. Bei 10 ELBW-Kindern wurden nach 7 und nach 12 Lebenswochen mehrere essentielle Spurenelemente bestimmt. Dabei wurde bei Zn, Se, I und Mo eine negative Bilanz gefunden. Auch für Ca, Mg und P war der Bedarf höher als die Nahrungszufuhr. Dies zeigte, daß das verwendete Ernährungsschema nicht ausreichte und daß für eine optimale Versorgung von ELBW-Kindern die Zufuhr von Mineralien und essentiellen Spurenelementen in den ersten Lebensmonaten erhöht werden muß. Neben den Bilanzstudien wurden zur besseren Beurteilung der Versorgung von Säuglingen mit essentiellen Spurenelementen mit Hilfe des Methodenverbundes HPLC/ICP-MS vergleichende Speziationsuntersuchungen an Muttermilchproben und an Ersatzmilchpräparaten durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, daß sich die Ersatzmilchen sowohl in der Konzentration als auch im Bindungsmuster der Spurenelemente signifikant von der Muttermilch unterscheiden. Die Unterschiede beruhen sowohl auf dem Basismaterial (Soya, Kuhmilch, Ziegenmilch) als auch auf den Supplementierungsformen der Hersteller.

Mitarbeit an der europäischen multizentrischen Erythropoietin-Studie: In Zusammenhang mit einer Klinikstudie (Sponsor Roche), die sich primär mit der Anregung der Erythrozytenbildung bei untergewichtigen Neugeborenen durch Gabe von Erythropoietin befaßte, wurden in verschiedenen Neonatologie-Zentren Europas Serum- und Erythrozytenproben von 240 ELBW-Kindern am 5. und am 63. Tag gesammelt und zeitgleich mit der zweiten Blutprobe zusätzlich auch gepoolte Nahrungsprouben. In allen Proben wurden die Spurenelemente Fe, Cu, Zn, Se, I, Mn und Mo und die Mineralelemente Ca, Mg und P analysiert. In den Seren und Erythrozyten wurden zusätzlich die Gehalte der Metalloenzyme Katalase, Glutathionperoxidase und Superoxid-Dismutase gemessen. Es wurde ein deutliches Absinken des Serum-Zinkspiegels mit

der Zeit gefunden, die auf eine ungenügende Versorgung mit diesem Element hinweist.

Bizentrische randomisierte geblindete Studie "Verhinderung des Zinkmangels bei untergewichtigen Neugeborenen": Aufgrund dieses Ergebnisses wurde in Zusammenarbeit mit der Abteilung für Neonatologie der Charité und der Fa. Milupa eine Studie an 60 Frühgeborenen (Geburtsgewicht 1000 - 1500 g) durchgeführt, die zwei Muttermilch-Fortifier mit und ohne Zusatz essentieller Spurenelemente erhielten. Das Hauptaugenmerk lag auf den Elementen Zink und Iod. Die Ergebnisse werden augenblicklich ausgewertet. Vorab läßt sich jedoch sagen, daß sich die Supplementierung mit dem spurenelementangereicherten Fortifier äußerst vorteilhaft auf die Entwicklung der Kinder ausgewirkt hat.

#### **Spurenelemente beim Morbus Alzheimer**

Frühere an anderer Stelle durchgeführte Untersuchungen an Hirngeweben von Alzheimer-Patienten hatten für die Spurenelemente Eisen und Aluminium deutlich höhere Werte im Vergleich zu Gesunden ergeben. Diese Ergebnisse wurden aber immer wieder angezweifelt, da die Probenahme nicht unter strikter Kontaminationskontrolle erfolgt war. In Zusammenarbeit mit der Universität Budapest wurden deshalb Untersuchungen unter Einsatz einer methodisch einwandfreien Präanalytik durchgeführt. Dabei wurden verstorbenen Alzheimer-Patienten und einer Kontrollgruppe unter sorgfältiger Vermeidung von Kontaminationen Proben aus verschiedenen Hirnregionen entnommen und in Gewebe und Fett getrennt. In diesen Proben wurden mit der instrumentellen NAA die Elemente Se, Zn, Fe, Rb und Cs bestimmt und in einem Teil der Proben nach radiochemischer Trennung Iod. Zwischen beiden Gruppen gab es deutliche Unterschiede für Se, Zn, Rb und Cs, nicht jedoch für Fe. Beim Iod sind wegen extrem hoher Gehalte in einigen Proben aus beiden Gruppen eindeutige Schlußfolgerungen noch nicht möglich.

#### **Untersuchung von Metalloproteinen in menschlichen Blut- und Gewebeproben**

Um erste Informationen über die Verteilungsmuster von Metalloproteinen in den menschlichen Geweben und über Zusammenhänge zwischen Krankheiten und Metalloproteinkonzentrationen zu erhalten, wurden verschiedene metallhaltige Proteine in Gewebecytosolen und Blutfraktionen durch Kopplung von chromatographischen Methoden und ICP-MS bestimmt.

Bestimmung von Metalloenzymen in Erythrocyten: Mit Hilfe dieses Verfahrens konnten in Erythrozyten die Gehalte der eisenhaltigen Katalase, der selenhaltigen Glutathionperoxidase und der kupfer- und zinkhaltigen Superoxid-Dismutase gemessen werden. Alle drei Enzyme, die nicht routinemäßig in der Klinik bestimmt werden, wurden in Erythrozytenproben von gesunden und schilddrüsenkranken Personen analysiert. Dabei ergab sich eine gute Übereinstimmung mit den über Enzymassays erhaltenen Werten.

Metalloproteine in Organen und Serumproben von Sepsispatienten: Informationen über organspezifischen Unterschiede in der Verteilung der Metalloproteine wurden durch Untersuchung der Cytosole von zwölf Geweben (Gehirn, Leber, Niere, Herz, Muskel, Milz, Pankreas, Schilddrüse, Lunge, Kno-

chenmark, Dünndarm, Dickdarm) eines verstorbenen Sepsispatienten erhalten. Bei Blutserumproben, die mehreren Patienten im Verlauf einer Sepsis entnommen worden waren, wurden die Änderungen im Verteilungsmuster von metallhaltigen Proteinen bestimmt. und unter anderem als Folge der Entzündung das Auftreten des sonst nur intrazellulär vorkommenden zinkhaltigen Metallothioneins im Blutplasma beobachtet.

Bestimmung der Metallverteilung in Metallothioneinen aus Lebercytosolproben bei verschiedenen Lebererkrankungen: Metallothioneine wurden ebenfalls im Cytosol von zirrhotischen Leberproben bestimmt, die nach Lebertransplantationen aus den erkrankten Organen entnommen worden waren. Die Bestimmung der Verteilung von Cd, Cu und Zn bei den beiden Metallothionein-Isoformen MT-1 und MT-2 zeigte, daß Kupfer bevorzugt an MT-2 gebunden vorlag während Zn und Cd vor allem in MT-1 gefunden wurde. Für die Klärung der Frage, ob sich aus dem Gehalt und der Metallbeladung der Metallothioneine ein ein Bezug zu der betreffenden Lebererkrankung herstellen läßt, müssen weitere Untersuchungen durchgeführt werden.

Metallothioneine in verschiedenen Gehirnregionen von Alzheimer- und Kontrollpatienten: In den Cytosolen von Gehirnproben, die aus der Hirnbank in München stammten, wurde neben den Isoformen MT-1 und MT2 auch das gehirnspezifischen MT-3 nachgewiesen. Bei Morbus Alzheimer-Patienten wurden im Vergleich zu den Kontrollen signifikante Änderungen in der Bindung von Kupfer und Zink an die Metallothioneine festgestellt.

D. Behne, U. Rösick, D. Behne, A. Kyriakopoulos, C. Wolf, A. Raab

**Arbeitsgruppe**

**SF7 Nukleare Messtechnik**



In der Arbeitsgruppe „Nukleare Meßmethoden“ werden Entwicklungsarbeiten zu kernphysikalischen Meßmethoden und kernspektroskopische Untersuchungen durchgeführt.

Mit dem Q3D-Magnetspektrometer können mit Hilfe der Elastic Recoil Detection Analysis (ERDA) sehr dünne Schichten leichter Elemente ( $Z < 20$ ) mit einer Tiefenauflösung von einigen Nanometern untersucht werden. Wasserstoffprofile können nunmehr ebenfalls mit dieser Methode gemessen werden. Im Zusammenhang mit ERDA wurde eine neue Methode der ladungsselektiven Messung von Energieverlusten und Umladungsprozessen entwickelt, die zur Untersuchung von Nichtgleichgewichtsprozessen in sehr dünnen Schichten eingesetzt werden kann. Diese Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit SF4, der TU-München und der TU-Darmstadt durchgeführt; im letzteren Falle ist außerdem die Bestimmung des Energieverlustes in verdünnten Medien und heißen Plasmen von Interesse.

In der Kernspektroskopie konzentrieren sich die Arbeiten auf die Untersuchung extrem deformierter Kerne. In einer Reihe experimenteller und theoretischer Arbeiten konnten wir zeigen, daß  $\alpha$ -Teilchen und  $^{16}\text{O}$ -Cluster durch kovalente Neutronen in Kernmolekülen gebunden werden. Diese Konfigurationen erschienen als angeregte isomere Zustände in leichten neutronreichen Kernen. Hierzu werden sowohl Experimente mit den Magnetspektrometern Q3D und SPEG (GANIL) durchgeführt als auch neue Möglichkeiten der  $\gamma$ -Spektroskopie mit Teilchen- $\gamma$ -Koinzidenzen entwickelt. Ein Detektorsystem zum Nachweis binärer Reaktionen für den Europäischen  $\gamma$ -Detektorball EUROBALL wurde gebaut und wird in einer Europäischen Kollaboration am Beschleuniger VIVITRON am IReS, Strasbourg, im Jahre 2001/02 zum Einsatz kommen.

Basierend auf der kernphysikalischen Nachweisteknik für geladene Teilchen wurde die Entwicklung eines neuartigen ortsauflösenden Detektors für thermische Neutronen (Reaktorneutronen und Spallationsquellen) begonnen, der mit einem  $^{157}\text{Gd}$ -Konverter arbeitet. Die Ortsinformation wird mit Hilfe von Mikrostreifenzählern in einer Niederdruckkammer erhalten. Dieses Projekt ist in ein europäisches Netzwerk (TECHNI), das sich besonders um die Entwicklung der zukünftigen Instrumentierung an ESS bemüht, eingebunden.

## ERDA und Kernspektroskopie

### ERDA-Messungen und Wechselwirkung von Ionen mit Materie

Mit Hilfe des Q3D-Spektrometers können Tiefenprofile im ERDA-Modus mit sehr hoher Auflösung gemessen werden, sofern die Schichtdicken sehr dünn sind. In diesem Tiefenbereich sind systematische Untersuchungen des Energieverlusts in Abhängigkeit der einzelnen Ladungszustände einer sich mit zunehmender Tiefe entwickelnden Ladungsverteilung notwendig. Es stellt sich schließlich ein dynamisches Gleichgewicht ein. Der spezifische Energieverlust eines Ions ist an seinen jeweiligen Ladungszustand  $q$  gekoppelt, in erster Ordnung mit  $q^2$ . Die Ladungsverteilung ändert sich durch elementare Prozesse des Elektronen-Verlustes und -Einfangs. Die quantitative Beschreibung dieser Prozesse mit theoretischen Modellen und die Verwendung dieser Ergebnisse bei der Berechnung des Energieverlustes führt zu einem tieferen Verständnis des Energieverlustes von Ionen in Materie. Mit Ionenstrahlen vom ISL werden deshalb Messungen zur Ladungsabhängigkeit des spezifischen Energieverlustes im Nichtgleichgewichtsbereich gemacht. Mit den Ergebnissen werden mikroskopische Modellrechnungen getestet.

#### Energieverluste im Nichtgleichgewichtsbereich

Am Q3D-Spektrometer wurde eine neue Methode zur Messung von Umladungsquerschnitten und Energieverlusten von Ionen im Nichtgleichgewichtsbereich entwickelt, deren Prinzip bereits im Ergebnisbericht 1999 vorgestellt wurde.

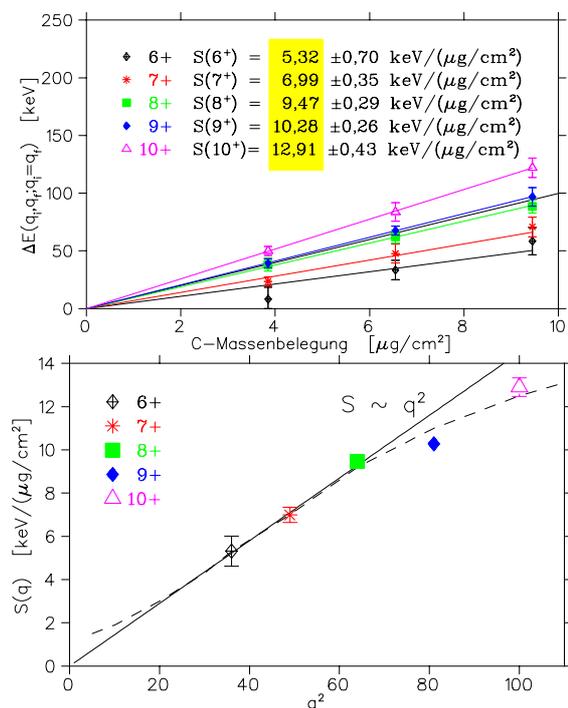


Abb. 1: Oben: Energieverlust von  $^{22}\text{Ne}$ -Ionen in Kohlenstoffschichten für festen Ladungszustand  $q$ . Der gelb unterlegte Bereich zeigt die Steigungen der eingezeichneten Geraden. Unten: Spezifischer Energieverlust für festes  $q$  in Abhängigkeit von  $q^2$ .

Für  $^{22}\text{Ne}$ -Ionen mit einer Energie von 2 MeV/Nukleon wurden erste Ergebnisse, die die Entwicklung der Ladungsverteilungen und der Umladungsprozesse in Abhängigkeit von der Schichtdicke betreffen, veröffentlicht. In Abb. 1, oben, ist die Analyse

der gemessenen Energieverluste für einzelne feste Ladungszustände  $q = 6^+ - 10^+$  ( $q = q_i = q_f$ , Eingangsladungszustand = Ausgangsladungszustand) gezeigt. Diese Daten wurden in einem Monte-Carlo-Verfahren aus den Meßwerten extrahiert. Die Linien stellen Ausgleichsgeraden durch vier Punkte dar. Ihre Steigungen ergeben den spezifischen Energieverlust  $S(q)$  von  $^{22}\text{Ne}$ -Ionen in den einzelnen Ladungszuständen (gelb unterlegt in Abb. 1, oben), sie sind in Abb. 1, unten, mit verschiedenen Symbolen gegen  $q^2$  aufgetragen. Die in erster Ordnung erwartete Abhängigkeit  $S(q) \sim q^2$  trifft für die drei ersten Werte zu, bei den beiden höchsten Ladungszuständen bewirken jedoch Effekte höherer Ordnung ein Abbiegen der Kurve mit geringerem Anstieg.

Wasserstoffprofile hoher Auflösung mit ERDA am Q3D-Spektrometer

Hochauflösende Tiefenprofilmessungen können am Q3D-Spektrometer mit ERDA (Elastic Recoil Detection Analysis) durchgeführt werden. Im Rahmen einer Diplomarbeit wurden nun auch die Meßbedingungen für die Messung von Wasserstoffprofilen etabliert. In Abb. 2 ist als Beispiel das Ergebnis einer Messung an einer Modellprobe gezeigt, deren Aufbau im oberen Teil des Bildes zu sehen ist. Das Profil der Bestandteile Si, Al, O, C wurde simultan mit einer Feldeinstellung gemessen und danach das H-Profil bei etwa halber Feldstärke.

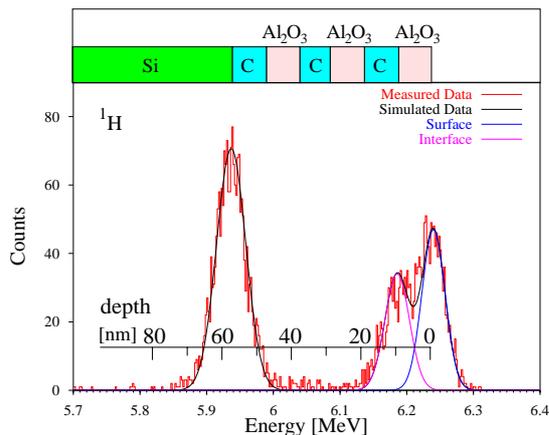


Abb. 2: Wasserstoffprofil einer Multischichtprobe, die abwechselnd aus je drei Schichten  $\text{Al}_2\text{O}_3$  und Kohlenstoff auf Si-Substrat aufgebaut ist.

Wasserstoff ist an der Oberfläche ( $0.7 \cdot 10^{15} \text{ at./cm}^2$ ), im ersten Interface ( $0.55 \cdot 10^{15} \text{ at./cm}^2$ ), und in der Grenzschicht zum Si-Substrat ( $1.3 \cdot 10^{15} \text{ at./cm}^2$ ), lokalisiert (zum Vergleich: die Schichten der Probe haben eine Dicke von ca.  $10^{17} \text{ at./cm}^2$ ). Die Tiefenauflösung beträgt an der Oberfläche 6 nm und wird mit zunehmender Tiefe durch Straggling-Effekte schlechter. Die Auflösung hängt außerdem von der Homogenität der Schichtdicken im Strahlfleckbereich ab.

H.G. Bohlen, W. von Oertzen, Abel Blazevic

**Kernspektroskopie**

Mit Hilfe eines Detektoraufbaus, in dem die beiden schweren Reaktionspartner in einer binären Reaktion nachgewiesen werden, soll ein neuer Zugang in der  $\gamma$ -Spektroskopie zu super- und hyperdeformierten leichten Kernen eröffnet werden.

Komplementäre Experimente von binären Reaktionen zur Spektroskopie molekularer Zustände und neutronenreicher Kerne werden mit den Magnet-spektrometern Q3D (HMI) und SPEG (GANIL) durchgeführt.

Dieses Forschungsvorhaben zielt auf die Spektroskopie sehr neutronenreicher leichter Kerne, insbesondere molekularer Strukturen, im Bereich der Isotope von Beryllium bis Neon sowie extrem deformierter Kerne mit  $Z = N$  bei  $A = 36 - 48$ . Mit Hilfe eines Detektoraufbaus zum Nachweis binärer Reaktionen in Koinzidenz mit  $\gamma$ -Strahlung aus den Reaktionspartnern werden neue Gebiete der Kernspektroskopie eröffnet. Der Mechanismus der Bevölkerung stark deformierter Seitenbanden wird untersucht.

a)  $\gamma$ -Spektroskopie mit binären Reaktionen

Mit dem Umzug von EUROBALL aus Legnaro (I) nach IReS Strasbourg (F) wurde ein geändertes Konzept des Aufbaus des Binary Reaction Spectrometer entwickelt und für den Einbau an EUROBALL IV vorbereitet (Abb. 1). Zur zusätzlichen Messung von geladenen leichten Teilchen wurde ein System aus segmentierten Silizium-Detektoren konzipiert und in Auftrag gegeben.

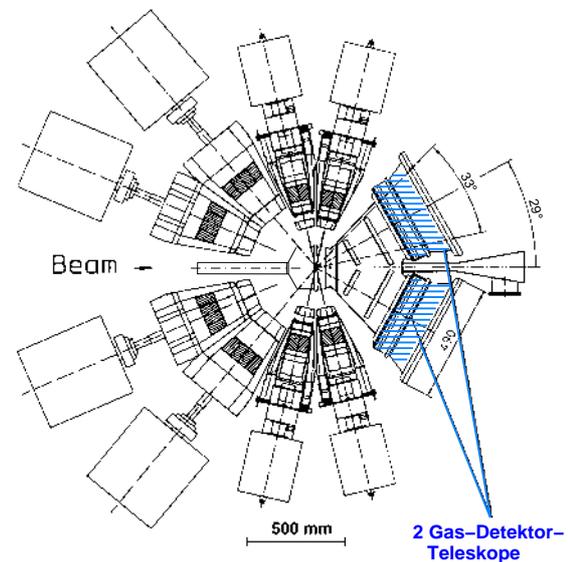


Abb. 1: Experimenteller Aufbau mit dem BRS und Euroball IV. Die Ge-Detektoren von Euroball IV sind mit ihren BGO-Shields und den Kryostaten um die Targetkammer herum plaziert. In Vorwärtsrichtung befinden sich die beiden Detektorteleskope des BRS.

**b) Clusteremissionen in  $\alpha$ -Cluster-Kernen**

Die Untersuchung von  $^8\text{Be}$ - und  $^{12}\text{C}$ -Emissionen aus hochangeregten Compoundkernen als binäre Reaktion wurde fortgesetzt und die verstärkte Bevölkerung der stark deformierten Seitenbande in  $^{48}\text{Cr}$  im Falle der binären  $^8\text{Be}$ -Emission nachgewiesen. Diese Reaktionskanäle können mit Halbleiter-Detektor-Teleskopen sehr effizient nachgewiesen werden (Abb. 2). Ein Experiment mit dem  $\gamma$ -Spektrometer GASP am LNL (Legnaro) mit diesem Reaktionskanal wurde in Zusammenarbeit mit dem LNL und IReS (Strasbourg) für das System  $^{28}\text{Si}+^{24}\text{Mg}$  durchgeführt. Die Auswertung des Experiments wurde begonnen.

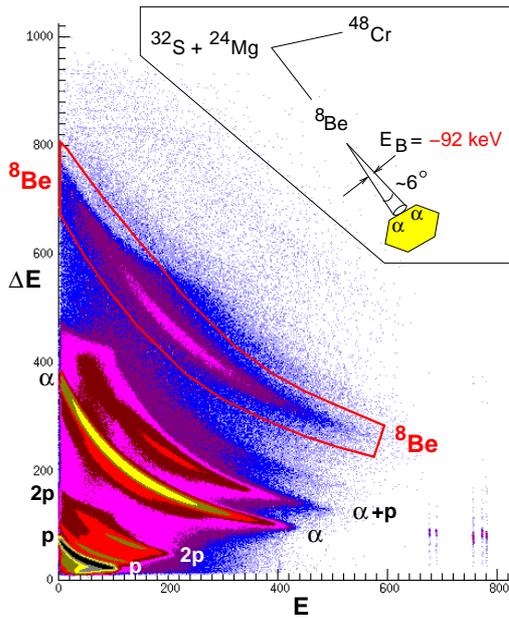


Abb 2: Teilchenidentifizierung im  $\Delta E$ -E-Diagramm. Zu sehen sind die Äste, die charakteristisch für die verschiedenen Teilchensorten sind. Das Inlet zeigt den Mechanismus des  $^8\text{Be}$ -Nachweises im  $\Delta E$ -E-Si-Zähler.

**c)  $\gamma$ -Spektroskopie leichter neutronenreicher Kerne**

Die Untersuchung molekularer Strukturen in neutronenreichen leichten Bor- und Beryllium-Isotopen wurde um  $\gamma$ -spektroskopische Untersuchungen erweitert. Dazu wurde ein Experiment mit dem  $\gamma$ -Spektrometer GASP am LNL (Legnaro) durchgeführt. Benutzt wurden hierbei die Strahl-Target-Kombinationen mit einem  $^7\text{Li}$ -Strahl und dicken  $^9\text{Be}$ - und  $^{10}\text{Be}$ -Targets, die jeweils mit einem Gold-Backing versehen waren. Die Bevölkerung der zu untersuchenden molekularen Bande in  $^{10}\text{Be}$  konnte durch die Beobachtung der Interband-Übergänge bestätigt werden. Die Auswertung der Daten dauert an. Desweiteren ist ein weiteres Experiment mit höherer Einschussenergie geplant, um die Intra-band-Übergänge in den molekularen Banden in  $^{10}\text{Be}$  und  $^{10}\text{B}$  zu untersuchen. Außerdem wurden aus der  $^7\text{Li} + ^{16}\text{O}$  Reaktion neue spektroskopische Daten zu  $^{21}\text{Na}$  und  $^{21}\text{Ne}$  gewonnen.

**d) Teilchenspektroskopie neutronenreicher leichter Kerne**

In Kernen sind molekulare Strukturen wegen der kurzen Reichweite der Kernkräfte äußerst ungewöhnlich. In neutronenreichen Be-Isotopen konnten wir jedoch solche Strukturen, die aus zwei  $^4\text{He}$ -Kernen mit großem Abstand und zusätzlichen Bindungsneutronen bestehen, durch die Spektroskopie molekularer Rotationsbanden nachweisen. Die Neutronen der p3/2-Schale bilden in diesen Kernen „klassische“  $\sigma$ - und  $\pi$ -Bindungorbitale. Für die erfolgreiche Bevölkerung dieser Zustände waren zwei Punkte entscheidend: 1. diese Strukturen werden durch den Transfer von Neutronen an  $^9\text{Be}$ , das bereits im Grundzustand eine molekulare Struktur hat, gebildet und es werden dabei hohe Drehimpulse erreicht; 2. die Neutronentransferreaktion muß bei hoher Einschussenergie durchgeführt werden, damit auch die bei hohen Anregungsenergien liegenden Mitglieder der Rotationsbanden bevölkert werden. Außerdem sind die sehr guten Strahleigenschaften, wie sie am ISL vorliegen, kombiniert mit dem Magnetspektrometer Q3D, wichtig.

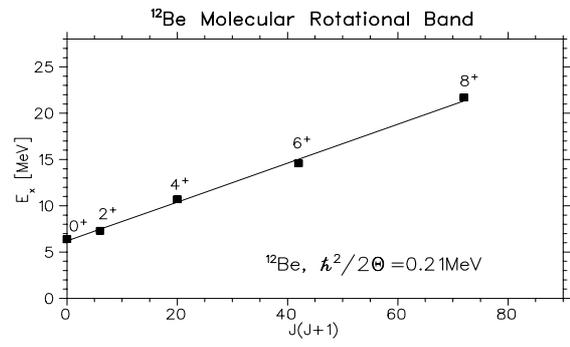
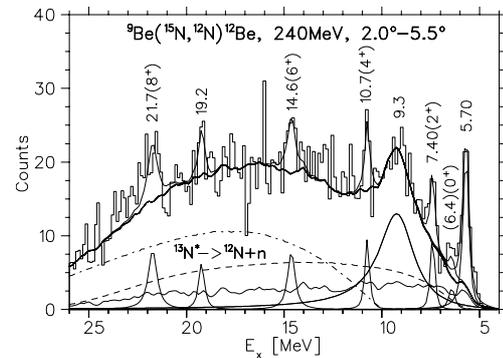


Abb. 3: Molekulare Rotationsbande in  $^{12}\text{Be}$ . Oben: Spektrum der  $^9\text{Be}(^{15}\text{N},^{12}\text{N})^{12}\text{Be}$ -Reaktion bei 240 MeV. Der Untergrund resultiert aus Drei-Körper-Prozessen. Unten: Darstellung der Anregungsenergie  $E_x$  der Mitglieder der Rotationsbande in Abhängigkeit von  $J(J+1)$ .

In Abb. 3 sind die Ergebnisse für die molekulare Rotationsbande von  $^{12}\text{Be}$  gezeigt. Es wurden vier Mitglieder einer  $K=0^+$ -Bande, deren Anregungsenergien zwischen 7.4 und 21.7 MeV und deren Spins zwischen  $2^+$  und  $8^+$  liegen, gefunden. Der  $0^+$  Bandenkopf konnte noch nicht im Spektrum wegen seines kleinen Wirkungsquerschnittes identifiziert werden. Mit der Extrapolation der Geraden in Abb. 3 (unten) wird eine Anregungsenergie von 6.4 MeV erwartet. Aus der Steigung der Geraden ergibt sich

ein Trägheitsmoment von  $\Theta = 2.4 \text{ MeV}^{-1}$ , dies entspricht einem Abstand der beiden  ${}^4\text{He}$ -Rümpfe von ca. 6-7 fm.

#### e) Kernregenbogen-Streuung im ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O}$ System und Zustandsgleichung von Kern-Materie

Die Regenbogenstreuung von  ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O}$  haben wir in den letzten Jahren intensiv sowohl experimentell als auch theoretisch untersucht. Regenbogenstreuung wird bei Streuvorgängen mit *attraktivem* Potential beobachtet, bei denen eine Ablenkung bis zu einem maximalen Winkel, dem Regenbogenwinkel, stattfindet. Der Verlauf der Streuintensität kann in diesem Bereich durch die Airy-Funktion beschrieben werden.

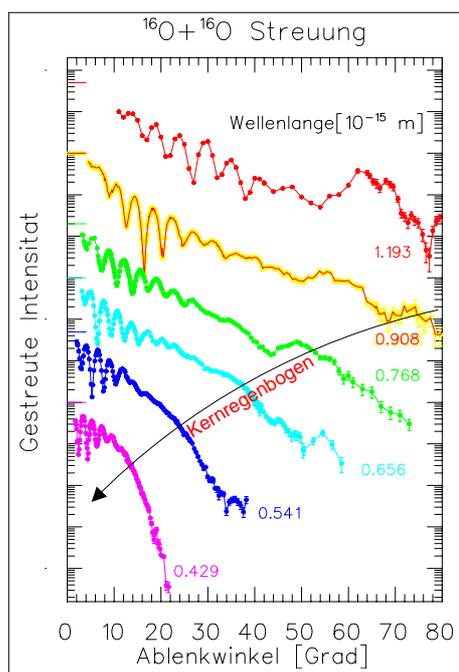


Abb. 4: Elastische Streuung von  ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O}$  (dividiert durch Mottstreuung) für sechs Energien. Die tiefste Energie ist 145 MeV, die höchste 1120 MeV, die de-Broglie-Wellenlängen im Schwerpunktsystem der streuenden Teilchen sind an den Daten angegeben. Das Regenbogenmaximum ändert seine Lage mit der Einschussenergie wie gezeigt.

Abb. 4 zeigt einen Überblick über die gemessenen Daten im Energiebereich von 145 MeV bis 1120 MeV. Dargestellt ist der Wirkungsquerschnitt dividiert durch den Mottquerschnitt, als Funktion des Streuwinkels. In dieser Darstellung kann man die engen Strukturen der Fraunhofer-Diffraktion bei kleinen Winkeln sehr gut erkennen, während das Regenbogen-Maximum (verursacht durch „Brechung“) seine Lage schnell mit der Energie (d.h. der Wellenlänge) verändert, und der primäre Regenbogen bei Energien kleiner  $E=250 \text{ MeV}$  außerhalb des messbaren Bereichs liegt (dieser ist für identische Kerne auf Winkel bis  $90^\circ$  begrenzt). Mit neuen Experimenten aus Laboratorien in Frankreich und Japan gibt es nun eine Datenbasis von sehr präzise gemessenen Winkelverteilungen über einen sehr

großen Energiebereich (75 MeV – 1120 MeV). Das große Interesse an diesen Daten und den theoretischen Analysen beruht auf der Tatsache, dass mit der Struktur der Kernregenbogenstreuung zum ersten Mal das Wechselwirkungspotential zwischen Kernen bis zu Abständen von 2 fm, bei denen sich die Kerne stark überlappen, eindeutig bestimmt werden konnte, d.h. bei Überlappungsdichten von  $2\rho_0$  ( $\rho_0$  Kernsättigungsdichte). Die genaue Analyse der  ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O}$ -Streuung lieferte daher neue Einsichten in die Zustandsgleichung kalter Kernmaterie, insbesondere im Bereich der Dichten von  $\rho/\rho_0 = 0.1 - 2.0$ , für den Inkompressibilitäts-Modul  $K$  konnte der Wert zu  $K = 250 \text{ MeV}$  ( $\pm 15\%$ ) bestimmt werden.

Zur Analyse der Daten haben wir ein semi-mikroskopisches Verfahren weiterentwickelt - das Doppel-Faltungs-Modell (DFM), in dem die Kerndichten mit einer dichte-abhängigen (effektiven) Nukleon-Nukleon Wechselwirkung gefaltet werden. Als freie Parameter gehen nur eine globale Normierung des DFM-Potentials ( $\sim 0.9$ ) und die Parameter der Dichteabhängigkeit der effektiven Wechselwirkung ein. Aus den letzteren kann dann die Kompressibilität der Kernmaterie über eine Hartree-Fock Rechnung bestimmt werden.

Eine eingehende Analyse aller Daten bis zu kleinsten Energien von 7 MeV/Nukleon ergab, dass bei den niedrigen Energien immer noch die gleichen attraktiven Potentiale wirken. Diese bewirken, dass bei  $E = 95 \text{ MeV}$  das Airy-Maximum dritter Ordnung beobachtet wird! In einer neuen Arbeit (zusammen mit V. Subbotin aus St. Petersburg) konnten wir zeigen, warum das stark attraktive Potential bei den niedrigen Energien nicht durch die Wirkung des Pauli-Prinzips zerstört wird. Die Überlappung der Fermi-Kugeln der beiden Kerne wird durch den Impuls der Relativbewegung der Kerne bestimmt. Das mittlere Feld produziert jedoch in dem Überlappbereich eine Potentialtiefe von über 150 MeV, ein Wert, der weit größer als die der Fermi-Impulse ist. In einer selbstkonsistenten Behandlung dieses Effektes, der den Abstand der Fermikugeln bestimmt, konnten wir zeigen, daß im Impulsraum die Fermi-Kugeln wieder von einander getrennt werden. Damit ist es uns gelungen, zur  ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O}$ -Streuung eine abschließende Erklärung aller physikalischen Aspekte zu erhalten. Insbesondere ist nun klar, warum in den Wirkungsquerschnitten der Anregungsfunktionen bei  $90^\circ$  sehr tiefe Minima auftreten können: es handelt sich *nicht* um Effekte von Resonanzen, sondern um die scharfen Minima der *Airy-Strukturen höherer Ordnung*.

Mit D.T. Khoa (VAEC, Hanoi) ist nun noch geplant, die experimentellen Daten zu den Reaktionskanälen (Neutrontransfer und inelastische Streuung) in diesem System auf Regenbogeneffekte zu analysieren.

W. von Oertzen, B. Gebauer, S. Thummerer, H.G. Bohlen

## Entwicklung eines ortsabbildenden Detektors für Reaktorneutronen

Im Detektorlabor der Arbeitsgruppe wird in Zusammenarbeit mit BENSC ein neuartiger, großflächiger Detektor höchster Auflösung für thermische Neutronen entwickelt: Mittels eines Gd/CsI-Mehrschichtenkonverters werden nach Neutroneneinfang

an  $^{157}\text{Gd}$  langsame Sekundärelektronen freigesetzt und in großflächigen Niederdruck-Mikrostreifengaskammern (MSGC) verstärkt und nachgewiesen. Der Detektor erfüllt die Anforderungen an hochauflösende Experimente bei ESS.

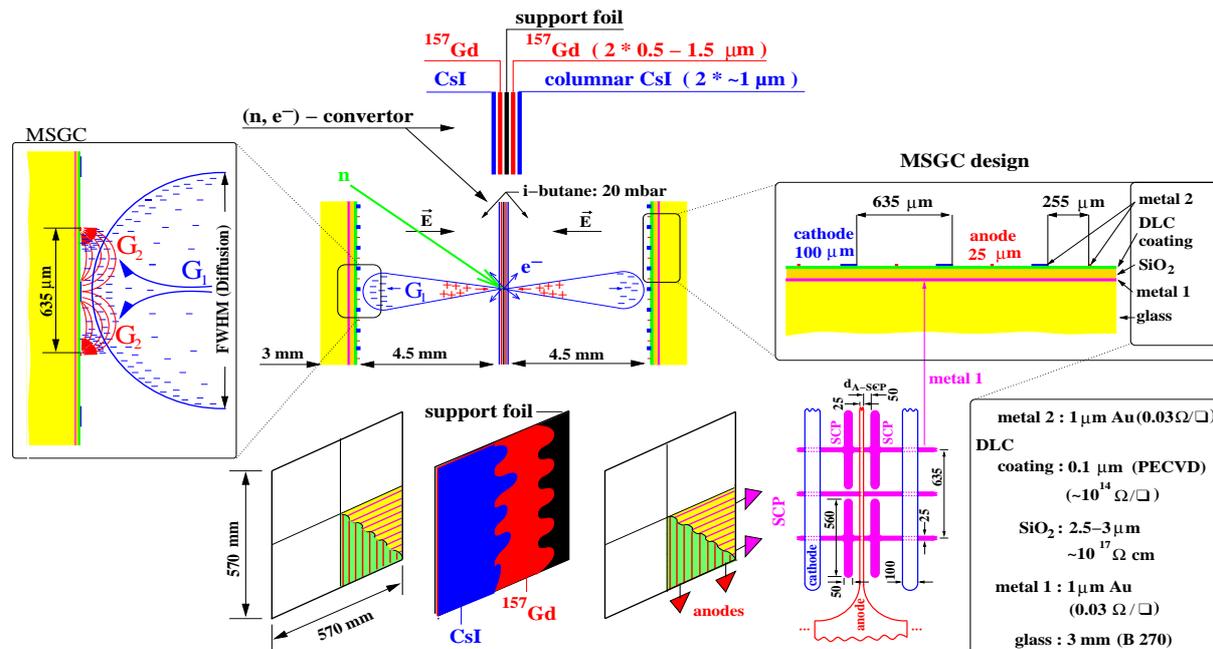


Abb. 1: Schematische Darstellung eines vierfach segmentierten MSGC-Großflächenzählers von 570 x 570 mm<sup>2</sup> Fläche. Das Diagramm zeigt in Teilbildern (i) den Zweistufiggasverstärkungsmodus im Niederdruckbereich (links), (ii) die Mehrschichtenkonverterfolie (oben), (iii) die vierfach segmentierten MSGC-Flächen beidseitig des Converters (unten), und Details (iv) des Mehrschichtenaufbaus der MSGCs (rechts oben) und (v) des Layouts der oberen Mikrostriefenebene (Metall 2) mit Anoden- und Kathodenstreifen und der unteren SCP-(Second-Coordinate-Pad)-Ebene (rechts unten).

### Entwicklung grossflächiger Hybrid-Mikrostreifengasdetektoren für thermische Neutronen

Für Anwendungen an BER II und langfristig an der gepulsten europäischen Hochflußspallationsneutronenquelle ESS wird ein neuartiger großflächiger vierfach-segmentierter Detektortyp für thermische und kalte Neutronen entwickelt, der zweidimensionale Ortsauflösungen von wenigen zehntel mm, Flugzeitaufösungen von wenigen ns und Zählraten von  $> 10^7/\text{s}$  erlaubt (Abb. 1). ESS liefert im Vergleich zu BER II eine Erhöhung des Flusses thermischer Neutronen im Puls um mehr als drei Größenordnungen. Ferner ist aufgrund der Verbesserung der Neutronenoptik eine Erhöhung der Neutronenflußdichte am Ort der Probe um ca. eine weitere Größenordnung zu erwarten. Daher sind neuartige hochauflösende und schnelle Detektoren erforderlich.

Es werden Hybriddetektoren entwickelt mit einer  $^{157}\text{Gd}/\text{CsI}$ -Mehrschichtenkonverterfolie mittig in

einem Niederdruckgasvolumen, welches beidseitig von zwei Mikrostriefengaskammern (MSGC) eines neuartigen zweidimensional ortsbestimmenden Typs begrenzt wird. Nach Neutroneneinfang an  $^{157}\text{Gd}$  wird mit  $87.3 \pm 2.5\%$  Effizienz mindestens ein schnelles Konversionselektron von 29-181 keV emittiert, welches aus der CsI-Oberfläche einen Cluster von niederenergetischen Sekundärelektronen (SE) emittiert. Durch das Einsetzen einer zweistufigen exponentiellen Gasverstärkung an der Converteroberfläche bei hoher reduzierter Feldstärke  $E/p$  bei  $p=20$  mbar und durch die  $^{157}\text{Gd}$ -Dicke von wenigen Mikrometern ist im Gegensatz zu Gasconvertern der Einfangsort des Neutrons sehr gut lateral und longitudinal parallaxefrei lokalisierbar. Für eine optimale SE-Emission wurden im Rahmen des Projekts dünne CsI-Schichten mit säulenförmiger Morphologie entwickelt. An der Optimierung der SE-Cluster-Größe wird zur Zeit gearbeitet.

Die MSGCs sind erstmalig (i) für den Niederdruckbetrieb optimiert und (ii) in einer Mehrschichtentechnologie mit integrierten Dünnschicht-Konden-

satoren und -Widerständen auf der Oberfläche großflächiger, robuster, 3 mm dicker Platten aus B270-Glas aufgebaut. Die Entwicklung der Multi-layer- Platten erfolgt (i) in Zusammenarbeit mit der schweizer Firma IMT und dem Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik (FhG-IST) und (ii) parallel dazu in Zusammenarbeit mit dem Institute for Physics of Microstructures der russischen Akademie der Wissenschaften IPM RAS. Die Frontend Elektronik wurde im HMI entwickelt. Eine bereits für ESS taugliche Datenaufnahmekarte mit 32 TDC-Kanälen und bis zu 2 MHz Durchsatzrate wurde in Zusammenarbeit mit dem Frank Laboratory of Neutron Physics (FLNP), JINR Dubna entwickelt.

B. Gebauer, W. von Oertzen, Ch. Schulz

## **RE Forschungsreaktor**



### Routinebetrieb

Der Forschungsreaktor wurde während des Jahres 2000 planmäßig betrieben. Nach einer durchgängigen dreiwöchigen Betriebszeit blieb der Reaktor jeweils eine Woche lang für Wartungs- und Prüfarbeiten abgeschaltet. Dazu kam eine geplante 6-wöchige Betriebspause ab Ende September zur fälligen Prüfung der Druckbehälter, Neuinstallation der digitalen Neutronenflussmesstechnik und der kompletten Neuverrohrung der Sprinkleranlage in der E-, R- und V-Halle. Insgesamt stand der BER II für den Experimentierbetrieb 5030 Stunden zur Verfügung, dabei wurden 47800 Megawatt-Stunden erzeugt.

Mit Abschluss der HEU-/LEU-Umstellung Ende 1999/Anfang 2000 wurden in diesem Jahr 4 LEU-Kerne aufgebaut. Die jeweils umfangreichen Inbetriebsetzungsprogramme wurden dabei vom Reaktorpersonal zügig und problemlos abgearbeitet. Ab dem 22.01.2000 wird im BER II nur noch niedrig angereicherter Brennstoff eingesetzt.

### Ertüchtigung von Komponenten am BER II

Der Austausch von technischen Komponenten am BER II infolge der Weiterentwicklung des wissenschaftlich-technischen Fortschritts wurde in diesem Jahr forciert. Der Komplex der Neutronenflussinstrumentierung wurde von der Analogtechnik auf digitale Messkanäle umgestellt und schrittweise über einen Zeitraum von zwei Jahren ausgetauscht. Diese Technik ist zuverlässiger, die Messkanäle sind selbstüberwacht und sie gestattet eine leichtere Durchführung der wiederkehrenden Prüfungen. Parallel dazu wurden die elektromechanischen Umformer, die den Strom für die Primärpumpen im Kühlkreislauf des BER II liefern, durch elektronisch statische Wechselrichter ersetzt. Damit wird ebenfalls eine höhere Zuverlässigkeit der Anlage garantiert.

### Kalte Neutronenquelle (KNQ)

Die Betriebssicherheit der KNQ wurde im Jahre 2000 weiter verbessert. Auf der Basis des im Jahre 1999 erarbeiteten Konzeptes zur Durchsetzung von Massnahmen zur weiteren Ertüchtigung der KNQ wurden die Betriebsperioden verlängert, um eine Minimierung des Warmfahrens der Anlage zu erreichen. Anfang 2000 wurden zusätzliche Kaltwassersätze installiert, die zur Kühlung der Turbine, Vakuumböden und Gebläse dienen. Ausserdem wurde die vierjährlich durchzuführende Prüfung der Pufferbehälter erfolgreich abgeschlossen. An der in Auftrag gegebenen Neuverrohrung der Jointbox zur Vermeidung von Kaltlecks und zur Erhöhung der Wartungsfreundlichkeit wird planmässig gearbeitet. Dabei werden speziell entwickelte Flanschverbindungen eingebaut, die auch bei den herrschenden extremen Temperaturdifferenzen eine hohe Dichtigkeit gewährleisten. Diese Massnahme wird im Jahre 2001 abgeschlossen. Mit 298 Tagen KNQ-Normalbetrieb bei 55 Tagen KNQ-Stillstand wurde im Jahre 2000 ein sehr gutes Ergebnis erzielt.

### Entsorgung

Im September 2000 wurde ein Behälter mit 17 abgebrannten hochangereicherten Brennelementen in die USA transportiert. Damit befindet sich kein HEU-Brennstoff mehr im HMI. Im Rahmen des Rückfüh-

rungsprogramms von US-originem Uran in die USA steht dieser Entsorgungsweg bis zum Jahre 2006 auch für abgebrannte niedrig angereicherte Brennelemente offen.

Für den Betrieb des BER II müssen jedoch langfristig weitere Entsorgungsalternativen bereitstehen. Vom HMI werden daher folgende Alternativen verfolgt:

#### *Zwischenlagerung in Transport- und Lagerbehälter in Ahaus.*

Das HMI hat mit der Betreibergesellschaft BZA einen Lagervertrag abgeschlossen und 3 Stellplätze für insgesamt 9 MTR-Transport und Lagerbehälter angemietet. Zur Nutzung dieser Kapazität ist jedoch noch die Zulassung der Behälter und die Aufbewahrungsgenehmigung im Zwischenlager erforderlich. Da einerseits das Inventarspektrum erweitert wurde und von Seiten der Genehmigungsbehörden Zusatzaufgaben abzuwickeln waren, wird mit der endgültigen Erteilung der Genehmigungen im Jahre 2001 gerechnet. Dieser Weg ist nach dem Auslaufen des amerikanischen Rückführungsprogramms die günstigste Variante für das HMI.

#### *Wiederaufarbeitung in La Hague*

Die Aufbereitungsanlage in La Hague kann keine Uran-Silizid Brennelemente wiederaufarbeiten. Da aber in Frankreich und den USA wiederaufarbeitbarer Uran-Molybdän Brennstoff mit höherer Uranichte entwickelt wird, kann dieser Entsorgungsweg für das HMI in Zukunft interessant werden. Das HMI ist sehr an die Entwicklung derartiger Brennelemente interessiert und prüft, ob diese Brennelemente auch im BER II eingesetzt werden können. Sollte dieser Weg beschritten werden, ist jedoch zu klären, wo der bei der Wiederaufarbeitung anfallende radioaktive Abfall gelagert werden kann. Eine langfristige Zwischenlagerung ist in La Hague nicht möglich.

### Reaktorwerkstatt

Hauptbetätigungsfeld der Reaktorwerkstatt sind Instandhaltungsarbeiten am BER II, einschliesslich seiner Komponenten. Darüber hinaus werden Arbeiten an den Experimentaufbauten in enger Zusammenarbeit mit den Experimentatoren des Bereiches Strukturforschung und von BENSIC durchgeführt. Ein Schwerpunkt der Arbeiten waren Wartungs- und Instandhaltungsarbeiten bei kernnahen Bestrahlungseinrichtungen. Dabei konnte u.a. dank der Flexibilität der Mitarbeiter der Werkstatt oftmals nicht geplante Aufgaben realisiert werden, was sich in einer bedeutenden Anzahl von Serviceaufgaben dokumentiert.

Die Werkstatt war im Jahre 2000 wie folgt ausgelastet: RE 48%; SF 32%; BENSIC 14%; SZ und Sonstige 6%. Die Serviceleistungen haben dabei eine Gesamtkapazität von 38% gebunden

