

Strategiepapier zur

Neutronenforschung in Deutschland: 2015-2045

Sebastian Schmidt^{*)}
Forschungszentrum Jülich

Andreas Schreyer
Helmholtz-Zentrum Geesthacht

und

Helmut Dosch
Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY

Inhalt

1. Zusammenfassung
2. Einleitung
3. Künftige wissenschaftliche Anwendungsgebiete der Neutronenforschung (KFN Papier 2013)
4. Anmerkung zum Anwendungsspektrum von Neutronen im Vergleich mit anderen analytischen Methoden
5. Status der weltweiten Neutronenquellen
6. Deutsche Nutzerschaft
7. Nationale Neutronen-Roadmap 2015-2045
8. Referenzen

^{*)} unter Mitarbeit von T. Brückel und D. Richter, FZJ

vom Lenkungsausschuss des Forschungsbereichs Materie der Helmholtz Gemeinschaft am 4.12.2014 verabschiedete Fassung

1. Zusammenfassung

- Von den herausragenden wissenschaftlichen Leistungen der Neutronenforschung in der Pionierzeit bis zur Lösung großer wissenschaftlicher und technologischer Herausforderungen der Zukunft: Neutronen waren und bleiben eine unersetzbare Sonde, der in einer stetig steigenden Zahl von Fachdisziplinen eine wachsende Bedeutung zukommt.
- Die Bereitstellung von Hochleistungsneutronenquellen mit optimierter Instrumentierung ist eine wichtige forschungspolitische Aufgabe in Deutschland und Europa.
- Notwendiges Szenario ist eine hierarchische Konfiguration von Neutronenquellen mit einer Europäischen Spitzenquelle, deren Nutzung auf einem Netzwerk nationaler Neutronenquellen aufbaut.
- Das deutsche Ausgangsszenario basiert auf einer Konzentration der Kräfte auf die Nutzung des FRM II und der auf komplexe Probenumgebungen spezialisierten Quelle des HZB. Die Rolle der europäischen Spitzenquelle nimmt das ILL in Grenoble ein.
- Die Zukunft der Neutronenforschung wird durch Spallationsquellen dominiert werden. Deshalb ist es notwendig, mittelfristig das ILL durch die europäische Spallationsquelle ESS zu ersetzen.
- Beim Bau und insbesondere bei der Instrumentierung der ESS sollte sich Deutschland entsprechend der Größe der Community mit ca. 6 „in kind“ Instrumenten engagieren.
- Es sollte, analog zum Engagement des JCNS an der SNS, an der ESS eine Helmholtz-Außenstelle installiert werden, die die von Deutschland gebauten Instrumente als einen „in kind“ Beitrag zur ESS betreibt und europäischen Nutzern für ihre Wissenschaft zur Verfügung stellt.
- Vom ersten Neutron am Target bis zur vollen Funktionalität aller Instrumente an der ESS wird ein Jahrzehnt vergehen. Deshalb ist ein entsprechender Überlapp des ILL – Betriebs mit der anlaufenden ESS entscheidend für das Wohlergehen der europäischen Neutronencommunity.
- Der in Bau befindlichen Hochflussreaktor PIK in Gatchina, Russland, könnte mittel- bis langfristig komplementäre Forschungsmöglichkeiten zu ESS bieten. Ein Engagement Deutschlands beim Bau von Instrumenten und Komponenten, bei deren wissenschaftlicher Nutzung, sowie beim Aufbau eines internationalen Nutzerzentrums wäre daher anzustreben.
- Längerfristig muss das heutige Netz der Mittelflussreaktoren in Europa durch nationale Spallationsquellen ersetzt werden. In Deutschland sollte nach 2030 eine Hochbrillanz-Spallationsquelle angegangen werden.

2. Einleitung

Die Entwicklung von neuen Hochleistungsmaterialien und effizienteren Wirkstoffen ist eine der großen Herausforderungen unserer Gesellschaft. Maßgeschneiderte Werkstoffe sind in allen Schlüsseltechnologien erforderlich, von neuartigen Materialien für erneuerbare Energiekonzepte über neue Werkstoffe für umweltfreundlichere Transportsysteme bis zu biokompatiblen Materialien für die Medizin. Viele der künftigen Materialien, Werk- und Wirkstoffe wird man auf molekularer Ebene synthetisieren. Hierzu bedarf es moderner, hochauflösender (insitu-) Analytik, um die Prozesse verlässlich zu beherrschen.

Neutronensonden gehören zu den wichtigen Säulen dieser Analytik bei der Lösung dieser großen Fragen. Moderne Neutronenquellen sind multidisziplinäre Großgeräte, welche für die gesamte Breite der Naturwissenschaften und für Technologieentwicklungen genutzt werden. In der Europäischen GENNESYS Studie (2009) wurden die künftigen Bedarfe an Röntgen- und Neutronen-Analytik für alle Bereiche der Forschung und Technologieentwicklung bis hin zu industriellen Anwendungen zusammengestellt /1/.

Deutschland gilt als eines der Pionierländer für die Entwicklung der modernen Neutronenforschung. Dies bezieht sich auf die Konzeption leistungsfähiger Neutronenquellen und neuartiger Instrumentierung sowie auf die wissenschaftliche Nutzung.

Die Bereitstellung von modernen Hochleistungs-Neutronenquellen mit optimierter Instrumentierung ist eine wichtige forschungspolitische Aufgabe in Deutschland und Europa.

3. Künftige wissenschaftliche Anwendungsgebiete der Neutronenforschung

Künftige wissenschaftliche Flaggschiffbereiche sind im Anhang zusammengestellt. Zusätzliche Informationen zu den künftigen Anwendungsgebieten von Neutronen in Forschung und Technologie-Entwicklung finden sich im aktuellen Eckpunktepapier des Komitees Forschung mit Neutronen (KFN): „Neutronenforschung für die wissenschaftlichen Herausforderungen der Zukunft“ (2013) /3/. Sie reichen von grundlegenden Untersuchungen der Struktur und Dynamik von Materie bis hin zur Energieforschung, Material- und Wirkstoffforschung.

4. Anmerkung zum Anwendungsspektrum von Neutronen im Vergleich mit anderen analytischen Methoden

Neutronen sind eine von vielen Sonden, die sich in der modernen Forschung für das Verständnis von Struktur, Dynamik und Funktion von Materialien als wesentlich herausgestellt haben. Andere wichtige Sonden, die für moderne Materialanalytik genutzt werden, sind z.B. Röntgenstrahlung und Elektronen oder Methoden wie NMR, diverse Verfahren der optischen Mikroskopie oder Rastersondenmethoden (STM, AFM, etc.).

Heute werden diese Methoden insbesondere in der Festkörper- und Materialforschung vermehrt komplementär eingesetzt, um durch die Kombination der verschiedenen Informationen ein möglichst vollständiges Bild von komplexen Materialien und Prozessen zu erhalten.

Die spezifischen Eigenschaften von Neutronen, die einen Erkenntnisgewinn über das hinaus liefern, was andere Methoden beitragen können sind u.a.

- die Natur der Wechselwirkung von Neutronen mit Materie, die die Beobachtung von besonders leichten Elementen (z.B. Wasserstoff) erleichtert und in der Regel großen Kontrast für benachbarte Elemente im Periodensystem liefert,
- die Energie der für Streuexperimente verwendeten Neutronen im Bereich der typischen Anregungsenergien von Gitterschwingungen, magnetischen Anregungen, sowie Diffusions- und Tunnelprozessen, die Neutronen zu einer besonders geeigneten Sonde zur Untersuchung der Dynamik von Materialien macht,
- die hohe Eindringtiefe zur Untersuchung großer Objekte oder in komplexen Probenumgebungen,
- das magnetische Dipolmoment, das eine einfache Analyse magnetischer Strukturen erlaubt,
- die im Vergleich zu Röntgenstrahlung oder Elektronen sehr geringe Strahlenschädigung (insbesondere wichtig bei Biomaterialien), und
- die Sensitivität auf verschiedene Isotope eines Elements.

Oft ist es eine Kombination mehrerer der vorgenannten Eigenschaften der Neutronen, die für die erfolgreiche Materialanalytik entscheidend ist.

Ein Beispiel aus der umsetzungsorientierten Forschung für zukünftige Energiesysteme: Die Beobachtung der Prozesse, die während der Beladung eines Wasserstofftanks innerhalb des Tanks auftreten, mit Neutronen liefert eine Vielzahl an Informationen, da Neutronen die Kombination aus hoher Durchdringungsfähigkeit (durch den Tank) und großer Sensitivität für Wasserstoff bieten. Eine derartige Information ist für die Entwicklung moderner Wasserstoffspeichertechnologien von großer Bedeutung.

In Deutschland gibt es namentlich in der Festkörper- und Materialforschung Arbeitsgruppen, die das komplette analytische Portfolio von Synchrotronstrahlung, Neutronenmethoden und Elektronenanalytik (Mikroskopie, Spektroskopie) regelmäßig nutzen. Die Abgrenzung von Neutronen zu den anderen Methoden hängt immer vom konkreten Einzelfall ab, hierzu zwei typische Beispiele:

- Während Neutronen die klassische Sonde für magnetischen Strukturen sind, hat die Entwicklung der resonanten magnetischen Röntgenstreuung durch ihre Elementselektivität und die Möglichkeit der Trennung von Spin- und Bahnmoment wesentliche neue Möglichkeiten der Analyse eröffnet. Die i.a. niedrig liegenden Röntgen-Anregungsenergien bedingen im Gegensatz zu Neutronen jedoch oft nur geringe Eindringtiefen der Röntgenstrahlung. Darüber hinaus ist die Absolutbestimmung des gesamten magnetischen Moments aufgrund der wesentlich einfacheren magnetischen Wechselwirkung oft nur mit Neutronen möglich.
- Moderne Verfahren der Elektronenmikroskopie liefern Strukturinformation mit höchster Auflösung. Allerdings ist die Information nur für dünne aufwändig präparierte Proben oder an Oberflächen verfügbar, und die statistischen Aussagen sind aufgrund der kleinen zugänglichen Probenvolumina limitiert. Röntgen- oder Neutronenstreuung erweitern die Informationstiefe wesentlich durch die Möglichkeit, größere Probenvolumina zu untersuchen, dabei sind Neutronen die Methode der Wahl, wenn die o.g. spezifischen Eigenschaften der Neutronen benötigt werden (z.B. Vermeidung von Strahlenschäden, Kontrastvariation durch Isotopensubstitution, etc).

5. Status der weltweiten Neutronenquellen

Die führende Stellung der Forschung mit Neutronen in Europa basiert auf nationalen Quellen, welche der Nutzerschaft in der Breite dienen, für Experimente, die nicht notwendigerweise die höchsten Neutronenflüsse benötigen, sowie auf überregionalen Spitzengeräten an der vordersten Front der Neutronenforschung.

Die wichtigen nationalen Quellen sind das LLB (F), das SINQ am PSI (CH), und das ISIS (UK), sowie in Deutschland der BER-II und der FRM-II. Das überregionale Spitzengerät ist aktuell in Europa das Institut Laue Langevin (ILL) in Grenoble mit dem derzeit flussstärksten Reaktor (HFR) und der modernsten Instrumentierung (ca. 40 Instrumente). Auch weltweit gesehen ist das ILL führend.

Es gibt auf der Welt nur wenige große Zentren, die sich durch einen hohen Neutronenfluss in Kombination mit einer breiten Instrumentierung auszeichnen (siehe Tab. 2 und Abb. 1).

Die Verteilung der Strahlzeit geschieht in allen Zentren durch unabhängige Gutachter. Die Überbuchungsfaktoren liegen typischerweise bei 2-3.

Quelle dt. Beteiligung	Betriebs- Beginn	Thermische Leistung [MW]	Nomineller integraler Fluss [cm ⁻² s ⁻¹]	Nomineller Peak Fluss [cm ⁻² s ⁻¹]	Nominal op. time [days p.a.]	Zahl der Nutzer- Instrumente	Mögl.Zahl v. Instru- menten	No. of User- Visits p.a.	Betriebs- Budget p.a.
FRM II (besondere Rolle der Hochschulen) national	2005	20	8 · 10 ¹⁴		240	23 operational 7 under construction	35	1000	55 M€
BER II national	1991	10	1,2 · 10 ¹⁴		220	11 operational 3 restricted	20	400	22 M€
ILL 25%	1971 (1995)	58	1,3 · 10 ¹⁵		200	27+10 CRG	>40	1400	80 M€ + 5 CRG
ESS 10-15% in Verhandl.	im Bau (lt.Planung 2019)	5 MW LP		4 · 10 ¹⁶	200	20 after 2025	>20		140M€
PIK	im Bau (lt. Planung ca. 2020)	100 MW	1,2 · 10 ¹⁵			ca. 25	bis zu 40		---
LLB ----	1985	14	3 · 10 ¹⁴		200	22 external use 3 internal use	25	600	25 M€
SINQ ----	1996	1 MW cont	1,5 · 10 ¹⁴		200	15	20	800	30M€
ISIS/ISIS-II ----	1985/ 2009	200µA SP		4,5 · 10 ¹⁵	180	27	35	1500	55M€
IBR-2 BMBF- .Dubna Vertrag	1984/ 2010	2MW	10 ¹³	10 ¹⁶	108	16			

Tabelle 2: Relevante Neutronenquellen in Europa (die farbig markierten Quellen spielen für die nationale Roadmap eine wichtige Rolle)

Außerhalb Europas sind neben den neuen MW-Spallationsquellen SNS am ORNL in Oak Ridge, USA, und JPARC in Tokai, Japan, vor allem das NIST in Gaithersburg bei Washington DC, USA ($2 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2 \text{ s}$), der HIFR-Reaktor am ORNL ($10 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2 \text{ s}$), sowie der JRR3-m-Reaktor in Tokai, Japan ($2 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2 \text{ s}$), zu erwähnen. Im pazifischen Raum ist im Jahr 2007 der OPAL-Forschungsreaktor am ANSTO in Sydney in Betrieb gegangen ($2 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2 \text{ s}$); Südkorea betreibt den Hanaro-Reaktor mit vergleichbarem Fluss.

China mit seiner expandierenden Wirtschaft betreibt seine Forschung mit Neutronen für die innovative Materialentwicklung am CARR-Reaktor bei Peking ($8 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2 \text{ s}$) und arbeitet an einem Projekt für eine Spallationsquelle in Dongguan (CSNS, vergleichbar mit ISIS).

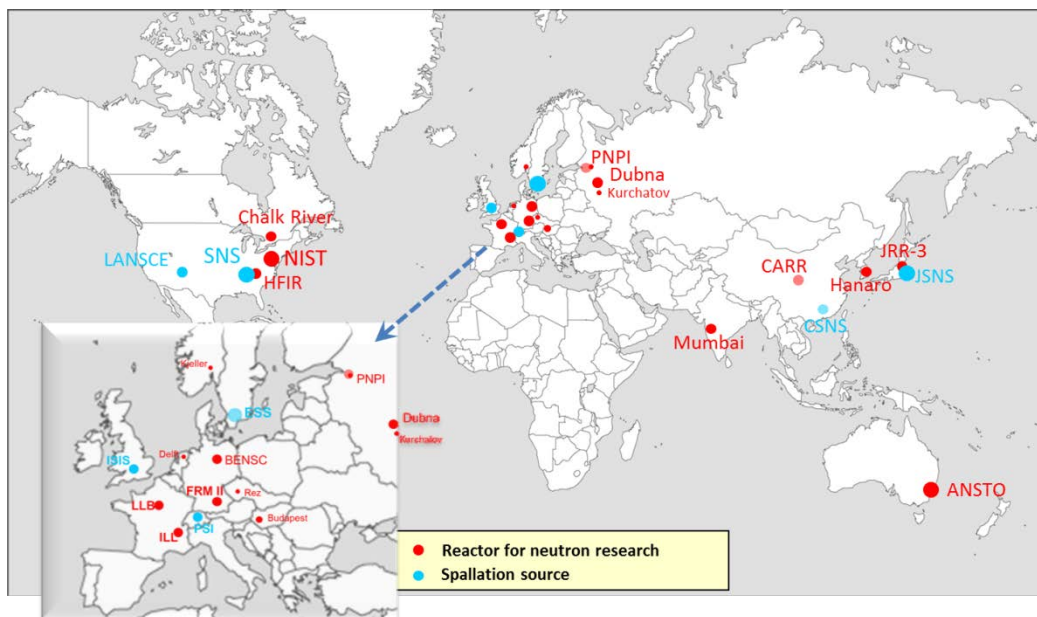


Abb. 1 Weltweite Neutronenquellen für Strahlrohrexperimente (BENS bezeichnet der Berliner Reaktor BER-II)

6. Deutsche Nutzer von Neutronen

Deutschland zeichnet sich durch eine lange Tradition von wissenschaftsgetriebener Methodenentwicklung und Instrumentenbau in der Neutronenforschung aus und ist hier zweifellos eines der führenden Länder weltweit. Deutschland besitzt das Fachwissen zum Bau von hochintensiven Neutronenquellen, siehe das „Compact Core Design“ am FRM II und die Entwicklung von Neutronen-Spallationsquellen.

Eine jüngste Erhebung des KFN zählt derzeit **1199 registrierte Neutronennutzer** in Deutschland. Sie finden sich in allen Sektoren des deutschen Wissenschaftssystems (Universitäten, MPG, HGF, WGL). Diese Analyse /4/ deckt sich sehr gut mit einer neueren Analyse der Nutzung des Hochflussreaktors durch die ILL Associates, nach der der HFR in der Zeit von 2000 bis 2009 von **1300 publikationsstarken Nutzern aus Deutschland** genutzt wurde (Frankreich: 1700 (ILL Sitzland !), Großbritannien: 1100). Nach Anzahl von Publikationen hat Deutschland die produktivste Neutronennutzergemeinde in Europa /2/.

Ein Teil der Stärke der deutschen Neutronen-Nutzerschaft ist die starke Vernetzung zwischen den Betreibern der Neutronenquellen, den nutzerunterstützenden Einrichtungen und den Universitäten. Diese Vernetzung wird durch die Verbundforschung gefördert, die es Universitätsgruppen ermöglicht, Instrumente an Neutronenquellen zu bauen. Durch diese Förderung wird die Weiterentwicklung der Nutzungsmöglichkeiten der Quellen und die Ausbildung von hervorragendem Nachwuchs ermöglicht.

Die wissenschaftliche Ausrichtung der Neutronennutzer hat sich sehr stark gewandelt. Heute ist sie geprägt von einer Vielfalt wissenschaftlicher Disziplinen, die immer mehr durch die neuen gesellschaftlichen und wissenschaftlichen Herausforderungen bestimmt werden und weniger durch die klassischen Aufteilungen der Naturwissenschaften (siehe Abb. 2).

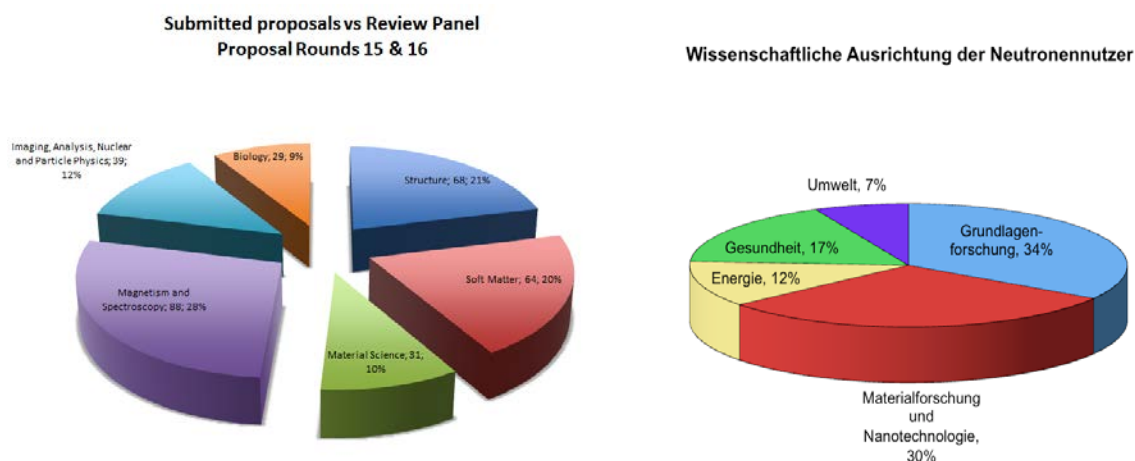


Abb 2: Links: Verteilung der nachgefragten Messzeit am MLZ (FRM-II) auf verschiedene Wissenschaftsgebiete (Begutachtungen 2. Hälfte 2012 und 1. Hälfte 2013); rechts eingereichte Messvorschlage gemittelt ber Antrage am ILL, ISIS und LLB nach gesellschaftsrelevanten Themen (aus „Report from the ILL Associates working group on Neutrons in Europe for 2025“)

7. Nationale Neutronen-Roadmap 2015-2045

Die langen Vorlaufzeiten bei der Realisierung von neuen Neutronenquellen erfordern eine langfristige Planung, die sicherstellt, dass auch in Zukunft ohne groere Unterbrechungen eine leistungsstarke Neutronen-Analytik fr Forschung und Industrie zur Verfgung steht. Das FZJ und in geringerem Umfang HZG werden absehbar langerfristig die mageblichen nutzeruntersttzenden Forschungseinrichtungen fr die Forschung mit Neutronen in der Helmholtz-Gemeinschaft sein.

Derzeit konzentrieren sich die Experimente der deutschen Neutronen-Nutzer auf

- den FRM II mit dem MLZ in Mnchen,
- den HFR (ILL) in Grenoble, sowie
- den BER-II am HZB in Berlin.

Darber hinaus werden Experimente von deutschen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern insbesondere am ISIS, an der SINQ und an der amerikanischen Spallationsquelle SNS durchgefhrt.

In den nächsten Jahrzehnten verändert sich die Neutronen-Landschaft in Deutschland und in Europa entscheidend:

- Der BER-II in Berlin wird voraussichtlich in 2020 nicht mehr in Betrieb sein.
- Die Europäische Spallationsquelle ESS wird voraussichtlich in den Folgejahren ab 2019 den Betrieb aufnehmen.
- Der Hochflussreaktor HFR (ILL) in Grenoble wird vermutlich um 2030 das Ende seiner Betriebszeit erreichen.
- Der russische Hochflussreaktor PIK in Gatchina wird um 2020 den Betrieb aufnehmen.

Basierend auf diesem Szenario der Entwicklungen in der europäischen Neutronen-Infrastruktur wird im Folgenden eine nationale Roadmap Neutronen 2015-2045 vorgestellt, welche

- **die strategische Langfristentwicklung des Neutronenquellen-Portfolios zur Deckung des nationalen Bedarfes der Wissenschaft und der Industrie berücksichtigt,**
 - **das spezielle Potential der Neutronenforschung für Forschung und Innovation weiter erschließt,**
 - **die künftigen neuen Möglichkeiten für die deutschen Nutzer aus Wissenschaft und Industrie optimal ausschöpft,**
 - **auf der erfolgreichen Synergie zwischen europäischen Spitzenquellen und einem Netzwerk von Mittelflussquellen aufbaut,**
 - **den Betrieb von mindestens einer nationalen Neutronenquelle für Forschung und Ausbildung sichert,**
- und zugleich sicherstellt, dass**
- **der finanzielle Korridor für die durch Deutschland finanzierte Neutronenforschung die gegenwärtige Größenordnung nicht übersteigt sowie**
 - **internationale Randbedingungen/Verpflichtungen soweit bekannt berücksichtigt werden.**

Wir gehen bei den nachfolgenden Überlegungen davon aus, dass die typische Betriebsdauer einer Neutronenquelle 40 bis 50 Jahre beträgt.

Die nationale Roadmap 2015-2045 setzt sich dann wie folgt zusammen:

7.1. FRM II, Heinz-Maier-Leibnitz-Zentrum (MLZ)

Der wissenschaftliche Nutzerbetrieb am FRM II wird zu gleichen Teilen gemeinsam von der Technischen Universität München (TUM) und der Helmholtz-Gemeinschaft (FZJ und HZG) unter der Führung des „Jülich Centre for Neutron Science“ (JCNS) getragen. Mit der Konstruktion des MLZ wurde das strategische Ziel des BMBF, die Nutzungsmöglichkeiten der stärksten deutschen Neutronenquelle im Rahmen eines Kooperationsvertrages zwischen TUM und den Helmholtz-Zentren zu optimieren, erfolgreich umgesetzt. Ein besonders wichtiges Element ist dabei die Einbeziehung der Universitäten bei Bau und Betrieb von Instrumenten. Am FRM II werden zur Zeit 23 Neutroneninstrumente betrieben (FZJ 11, HZG 2). Sieben weitere sind im Bau oder in der Projektierung.

Die Helmholtz-Gemeinschaft wird in Zukunft über die beiden Kompetenzzentren JCNS des FZJ und GEMS des HZG maßgeblich am Betrieb und der Weiterentwicklung der Forschungsinstrumente beteiligt.

Künftige Rolle und weitere Planungen:

- Der FRM II ist mittelfristig nach der geplanten Abschaltung des BER II die einzige nationale Quelle und spielt daher eine zentrale Rolle für die deutschen Nutzer.
- Er sollte daher mit dem jetzigen finanziellen Engagement weiter entwickelt werden.

7.2. BER-II, HZB, Berlin

BER II wird durch das HZB in Berlin betrieben. Durch geschickte Fokussierung auf anspruchsvolle Probenumgebung in Verbindung mit modernster Instrumentierung gelang es dort, trotz des relativ niedrigen Flusses eine Spitzeneinrichtung der internationalen Neutronenforschung zu errichten. So erlaubt etwa die Kombination von höchsten Magnetfeldern mit sehr tiefen Temperaturen einzigartige Experimente mit Neutronen. Der BER II bedient neben seinen deutschen Nutzern ein breites Spektrum ausländischer Wissenschaftler.

Künftige Rolle und weitere Planungen:

- Der BER II soll 2020 außer Betrieb gehen.
- Für die Nutzung der hochmodernen Instrumentierung nach der dauerhaften Abschaltung sind eine Reihe von Alternativen denkbar.

7.3. HFR, ILL, Grenoble

Das ILL ist sowohl was die Qualität seiner Neutronenstrahlen angeht, als auch in seiner Instrumentierung zurzeit die mit Abstand weltbeste Neutronenquelle und ermöglicht deutschen Forschern einzigartige Forschungsmöglichkeiten. Deutschland ist mit etwa 25 % der Kosten am Hochflussreaktor des ILL in Grenoble beteiligt. Das FZJ ist deutscher Gesellschafter und in Kooperation mit anderen Partnern an drei Instrumenten direkt beteiligt.

Künftige Rolle und weitere Planungen:

- Bis zum volleingefahrenen Betrieb der ESS ist der Betrieb und die Nutzung des HFR für die deutschen Forschungsgruppen unabdingbar. Daher muss ein möglichst großer Überlapp zwischen ILL und ESS sichergestellt werden. Das Betriebsende des HFR liegt nach jetzigen Überlegungen im Zeitraum um 2030.
- Die freiwerdenden Mittel könnten für die Langfristentwicklung des Quellenportfolios z. B. für eine zukünftige nationale Spallationsquelle oder für eine Verstärkung der deutschen Beteiligung an der ESS eingesetzt werden.

7.4. Beteiligung an der amerikanischen Spallationsquelle SNS, Oak Ridge

Die SNS des Oak Ridge National Lab ist die derzeit leistungsstärkste Spallationsquelle. Das JCNS des FZJ ist über einen Kooperationsvertrag an der SNS beteiligt und gewährleistet den Zugang deutscher Nutzer zum Neutronen-Spin-Echo-Gerät sowie zwei weiteren Instrumenten (Strahlzeitverteilung durch das MLZ).

Künftige Rolle und weitere Planungen:

- Die Nutzung der SNS-Instrumentierung durch deutsche Nutzer ist auch für die Vorbereitung der deutschen Nutzerschaft auf den ESS-Betrieb von Bedeutung.
- Der derzeitige Vertrag zwischen FZJ und der SNS ist auf 10 Jahre angelegt.

7.5. Beteiligung an der Europäischen Spallationsquelle ESS, Lund

Die Europäische Spallationsquelle ESS wird als gepulste MW-Quelle langfristig eine vergleichbare Bedeutung wie das ILL in Grenoble haben und ist deshalb von hoher strategischer Bedeutung. Sie wird nach heutigem Planungsstand die leistungsfähigste Spallationsneutronenquelle der Welt sein. Es wird derzeit angestrebt, dass die Europäische

Spallationsquelle ESS im Jahr 2019 als ein Gemeinschaftsprojekt 17 europäischer Länder in Betrieb gehen wird. Ziel ist, die ESS bis zum Jahr 2025 zur vollen Leistungsfähigkeit zu bringen.

Die ESS in Schweden wird für die deutschen Nutzer mittel- und langfristig zur wichtigsten Neutronenquelle werden. Eine sichtbare Beteiligung Deutschlands an der ESS, die den deutschen Nutzern einen gesicherten Zugang zu dieser neuen Quelle ermöglicht, ist deshalb unabdingbar.

Künftige Rolle und weitere Planungen:

- Es ist geplant, insgesamt etwa 6 deutsche Instrumente an der ESS zu bauen, mit dem Ziel diese nach Inbetriebnahme der ESS im Rahmen von nationalen und internationalen Kooperationen zu betreiben. Beteiligte Helmholtz-Zentren sind das FZJ und in geringerem Umfang das HZG.
- Der mögliche (inkind-) Eigenbeitrag von FZJ und HZG zum Betrieb könnte die Finanzierung des Betriebs der Helmholtz-Instrumente an der ESS sein (Personal für Betrieb und Nutzerbetreuung, lfd. Kosten). Damit soll auch eine optimale Betreuung der deutschen Nutzer sichergestellt werden. Hierzu wird vorgeschlagen, eine Helmholtz-Außenstelle an der ESS einzurichten, die vom Helmholtz-Zentrum FZJ zusammen mit HZG gemeinsam betrieben wird.
- In ihrer Mitgliederversammlung vom 11.09.2013 haben die Mitglieder der Helmholtz-Gemeinschaft beschlossen, dass die Helmholtz-Gemeinschaft keinen Beitrag zu Bau und Betrieb der ESS leisten wird. Davon unberührt ist das Engagement einzelner Zentren.

7.6. Deutsche Beteiligung am russischen Hochflussreaktor PIK, Gatchina

In Russland wird in Gatchina bei St. Petersburg der neue Hochflussreaktor PIK (Neutronenfluss für Strahlrohrexperimente vergleichbar mit dem ILL) voraussichtlich gegen Ende des Jahrzehnts in Betrieb genommen. PIK kann längerfristig als Hochflussreaktor eine wesentliche Rolle in der europäischen Neutronenlandschaft spielen. Insbesondere vor dem Hintergrund der starken russischen Beteiligung an XFEL und FAIR sollte eine angemessene deutsche Beteiligung an PIK zeitnah geklärt werden. Russland hat eine große Tradition in Neutronenforschung, deshalb würde eine deutsche Beteiligung am Bau und Betrieb von Instrumenten eine wichtige neue Kooperation zwischen deutschen und russischen Wissenschaftlern eröffnen.

Künftige Rolle und weitere Planungen:

- Das HZG hat acht Instrumente des in 2010 abgeschalteten Forschungsreaktors FRG-1 an den PIK Reaktor nach Gatchina transferiert. Im Gegenzug sind HZG vertragsgemäß an den entsprechenden Instrumenten dauerhaft 15% der Strahlzeit zur Nutzung durch HZG zugesagt. Ob diese Strahlzeit auch für andere deutsche Nutzer verfügbar gemacht werden kann, muss ausgehandelt werden. Im Oktober 2013 hat das FZJ gemeinsam mit dem Kurchatov Institut in enger Abstimmung mit dem BMBF unter Beteiligung von TUM, HZG, KFN und ILL einen „PIK-Workshop“ in Gatchina organisiert. Ein Engagement Deutschlands am Bau von Instrumenten und Komponenten, bei der wissenschaftlichen Nutzung, sowie beim Aufbau eines internationalen Nutzerzentrums bietet weitreichende wissenschaftliche Chancen. HZG und FZJ sind an der Konzeption der Instrumentensuite in intensiver Abstimmung mit Gatchina beteiligt.

- Die Finanzierung der aufzubauenden Instrumentierung ist von russischer Seite zugesichert.
- Um den Forschungsbetrieb und den Zugang zu Messzeit nach internationalen Standards zu ermöglichen, sollte frühzeitig ein International Scientific Advisory Board (PIK-ISAB) installiert werden.
- Wünschenswert wäre eine dt.-russische Projektförderung (ggf. über IRI abgewickelt) zur Neutronenforschung an PIK und am MLZ, um dt.-russ. Kooperationen zu unterstützen.

7.7. Zusammenarbeit mit China

Leistungsfähige modernisierte Instrumente wurden nach Abschaltung des DIDO-Forschungsreaktors in Jülich an den neuen Forschungsreaktor CARR in China verkauft. Jülicher Forscher haben beim Aufbau und der Inbetriebnahme der Instrumente geholfen und den Betrieb jetzt in die Hand der Wissenschaftler am CARR-Reaktor gegeben. Neben dem damit erzielten Anspruch auf einen deutschen Anteil an der Messzeit, dient diese Kooperation als Kristallisationspunkt für eine zukünftige deutsch-chinesische Zusammenarbeit in der Neutronenforschung und darüber hinaus.

Künftige Rolle und weitere Planungen:

- Die dt.-chinesische Zusammenarbeit in Forschung mit Neutronen sollte weiter erkundet werden.
- Finanzielle Verpflichtungen entstehen nicht.

7.8. Planungen für eine nationale Hochbrilliance-Neutronenquelle

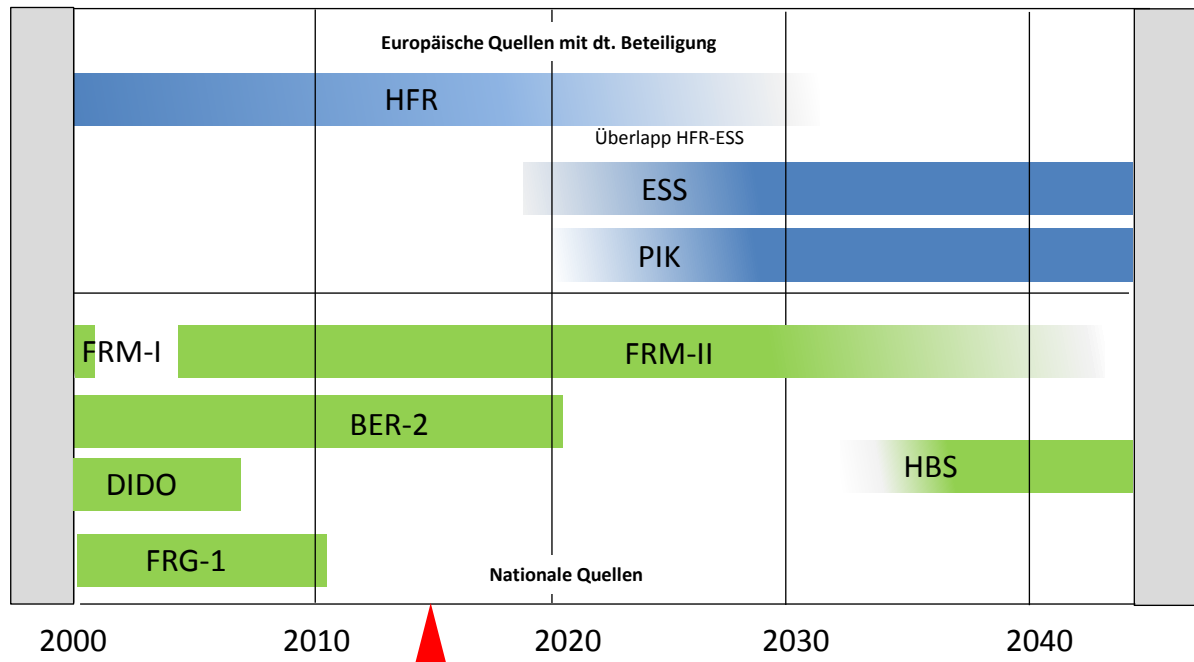
Es muss vor dem Hintergrund der Beschränkung von Laufzeiten rechtzeitig geprüft werden, ob langfristig (2030-40) eine nationale gepulste Spallations-Neutronenquelle (High Brilliance Source, **HBS**) gebaut werden soll. Aus heutiger Sicht wird Deutschland auch langfristig eine nationale, vollfunktionsfähige Neutronenquelle brauchen. Ziel ist hier das Design neuartiger Moderator–Reflektor- und Strahltransport-Konzepte, die eine gerichtete Ausstrahlung der moderierten Neutronen zu den Instrumenten ermöglicht.

Künftige Rolle und weitere Planungen:

- Es sollten rechtzeitig Planungen zu einer nationalen Neutronenquelle gestartet werden.
- Diese zukünftige Quelle könnte eine Hochbrilliance-Spallationsquelle sein.
- Die einschlägigen deutschen Institute und Forschungszentren sollten entsprechende Design-Studien durchführen.

7.9. Vorgeschlagenes Neutronenszenario

Ein grobes zeitliches Szenario ist basierend auf 6.1.-6.9. in Abb 3 dargestellt.



8. Referenzen

/1/ GENNESYS White Paper, H. Dosch, M. van de Voorde, Max-Planck-Institut für Metallforschung, ISBN 978-3-00-027338-4 (2009)

/2/ KFN Papier „Perspektiven der Neutronenforschung in Deutschland im Licht der kommenden neuen Europäischen Spallationsquelle“ (2011)

/3/ KFN Papier “Neutronenforschung für die wissenschaftlichen Herausforderungen der Zukunft“ (2013)

/4/ Report from the ILL associates Working Group „Neutrons in Europe for 2025“

Anhang 1: „Flaggschiffbereiche“ für die Forschung mit Neutronen

Heutige Neutronenquellen, wie auch eine zukünftige ESS, wirken mit ihrer Multidisziplinarität in die gesamte Breite der Naturwissenschaften und Technologieentwicklungen. Deshalb ist eine Vorhersage des Gelingens einzelner zukünftiger „Flaggschiff-Experimente“ unmöglich, aber wir können mit großer Sicherheit Vorhersagen darüber machen, welche wissenschaftlichen und technologischen Bereiche die Neutronen und insbesondere eine ESS wesentlich voranbringen werden. Im Folgenden werden kurze Skizzen derartiger „Flaggschiff-Gebiete“ dargestellt.

A1.1 Energie

Die Versorgung mit Energie zu einem akzeptablen Preis mit beständiger Verfügbarkeit ist eine der Grundlagen unserer industriellen Zivilisation. Eine der wichtigsten gesellschaftlichen Herausforderungen des 21. Jahrhunderts ist das Erreichen einer nachhaltigen Energiewirtschaft. Neutronen bieten einen idealen Zugang zu Struktur, Kinetik und Dynamik von vielen Materialien und Prozessen, die für die Energieerzeugung, Umwandlung und Speicherung von größter Wichtigkeit sind. So lassen sich mit Neutronen Strukturmaterialien optimieren, die eine wesentliche Rolle für eine effizientere Energienutzung im Transport oder bei der Energieproduktion – von Dampfturbinen, Windräderrotorblättern bis hin zu Materialien für Fusionsreaktoren spielen. Wasserstoff ist ein idealer Brennstoff für mobile Anwendungen. Die technologische Herausforderung sind Wasserstoffspeicher, die mit niedrigen Kosten, Gewicht und hoher Kapazität arbeiten. Hier sind Neutronen mit ihrer großen Empfindlichkeit für das Wasserstoffatom eine ideale Sonde. Für Solarzellen aus organischen Polymeren ist Selbstorganisation von größter Bedeutung. Für die Aufklärung ihrer Bedingungen werden Neutronen mit der Möglichkeit der Kontrastvariation eine entscheidende Rolle spielen. Ähnliches gilt für die Aufklärung der Prozesse bei der Herstellung von Biokraftstoffen, sowie bei der Erforschung von neuartigen Materialien für Elektrolyte, die ein wesentlicher Bestandteil von Batterien und Brennstoffzellen sind.

A1.2 Medizin und Gesundheit

Neutronenforschung wird in diesem Bereich in drei Richtungen wirken. (i) Sie wird helfen, biomedizinische Materialien wie z. B. Implantate zu optimieren. (ii) Sie wird eine wichtige Rolle bei der Erforschung der molekularen Ursachen von Krankheiten spielen und (iii) sie wird eine Rolle bei der Aufklärung grundlegender biomolekularer Prozesse haben. Beispiele zu (i) sind die Optimierung der biokompatiblen Oberflächenschichten bei künstlichen Hüftgelenken oder der Einsatz von Hydrogelen für die Verbesserung der Technologie von chirurgischen Eingriffen. Bei den molekularen Ursachen von Krankheiten (ii) werden Themen wie z.B. die Amyloid-Aggregation insbesondere in den frühen Stadien bei der Bildung von Alzheimer oder die Wechselwirkung von Medikamenten mit den Zielmolekülen unter besonderer Berücksichtigung der Dynamik im Fokus stehen. Spezielle Beispiele sind der Cholesterintransport und seine Auswirkung auf neurodegenerative Krankheiten oder bei Herzproblemen oder die Verteilung und Dynamik von Neurotransmittern in polymeren Augenimplantaten. (iii) Zur Aufklärung grundlegender Prozesse ist ein Zusammenspiel von Neutronen- und Röntgenstrahlen von größter Bedeutung. Während die Röntgenstrahlen die Molekülstruktur liefern, können Neutronen z. B. die detaillierten Protonierungszustände nahe von Katalysatoratomen in Enzymen liefern. Neutronen werden insbesondere auch Aufklärung über die Rolle der Dynamik in biophysikalischen Prozessen, wie z.B. der Allosterie oder der funktionalen Dynamik in Enzymen oder bei der Bewegung und Funktion von Proteinen in dichten Umgebungen wie in der Zelle liefern. Ein weiteres neues Feld kann die Funktionalität und Dynamik von Membranproteinen in ihrer Membranumgebung sein. Bei den meisten dieser Themen wird die ESS den entscheidenden Unterschied machen. Heutige Neutronenquellen mit ihrer begrenzten Intensität sind vielfach nicht in der Lage, die Fragestellung anzugehen.

A1.3 Elektronik und Informationstechnologie

Die in 2007 durch einen Nobelpreis geehrte Entdeckung des Riesenmagnetowiderstandseffekts („Giant Magnetoresistance“ GMR), bei dem magnetische Felder den elektrischen Widerstand beeinflussen, war Startpunkt der „Spintronik“ – einer Informationstechnologie unter Nutzung des Spins des Elektrons. Diese verspricht mannigfaltige Vorteile, etwa die Vermeidung von ohmscher Verlustwärme und damit die Möglichkeit weiterer Miniaturisierung. Heute ist der GMR-Effekt Grundlage für die Leseköpfe in magnetischen Speichermedien. Neutronen mit ihrer Empfindlichkeit für magnetische Eigenschaften führten zur Entzifferung der zugrunde liegenden magnetischen Strukturen. Für die zukünftige Entwicklung dieser Technologie wird der Einsatz von Neutronenstrahlen zur Optimierung von Spinstrukturen und Kinetik von größter Bedeutung sein. In der Spintronik der Zukunft werden völlig neue Materialien und Dünnschichtmaterialsysteme zum Einsatz kommen, die vielfach auf komplexen Übergangsmetalloxiden basieren. Diese weisen an den Grenzflächen unerwartete, emergente Eigenschaften auf, die zu neuen Funktionalitäten führen. Neutronen erlauben die tiefenaufgelöste Bestimmung der Ordnung von Spin-, Orbital- und Ladungsfreiheitsgraden, die wichtigste Voraussetzung zum Verständnis der Grenzflächenphänomene und damit zur Auslegung neuartiger Bauelemente sind. Ein Beispiel für neuartige Materialien sind die Multiferroica, bei denen magnetische, elektrische und mechanische Eigenschaften koppeln. Sie könnten die Basis für nichtflüchtige, schnelle Datenspeicher mit ultrakleinen Schaltleistungen, sowie für vielfältige Sensoren sein. Zur Aufklärung ihrer strukturellen und dynamischen magnetischen Eigenschaften spielen Neutronen eine entscheidende Rolle. Weitere Miniaturisierung führt zu molekularen Magneten, die bereits als mögliche Qubits in der Quanteninformationsverarbeitung diskutiert wurden. Für die Erforschung ihrer strukturellen und dynamischen Eigenschaften spielen Neutronenstrahlen eine wesentliche Rolle. Ein weiteres Feld ist die Kopplung elektrischer Schaltkreise mit Biomolekülen und Zellen. Für ihre Funktion ist die Schaltkreisoberfläche von entscheidender Bedeutung. Neutronenreflektionsexperimente werden wichtige Einsichten liefern.

A1.4 Industrielle Anwendungen und Ingenieurwesen

Materialwissenschaften und das Ingenieurwesen sind der Schlüssel für neue Technologien, Wohlstandsvermehrung und nachhaltigem Wachstum. Zur Optimierung von Werkstoffen, Prozessen und Bauteilen werden vielerlei diagnostische Werkzeuge eingesetzt. Die Neutronen liefern strukturelle Einsichten sowie Informationen zur Kinetik und zum dynamischen Verhalten. In Konstruktionsmaterialien, wie im Flugzeugbau ist das Beherrschen interner Spannungen von größter Bedeutung. Airbus z.B. ist dabei, Nieten im Flugzeugbau durch Schweißnähte zu ersetzen. Da sich interne Spannungen zu äußeren Belastungen addieren, ist ihre Beherrschung von extremer Wichtigkeit für die Sicherheit eines Flugzeuges. Neutronen werden benutzt, um die Schweißprozesse zu validieren. Im Fahrzeugbau vermeiden immer leichtere Komponenten unnötigen Kraftstoffverbrauch. Ein Beispiel ist die Optimierung von mehrphasigen Aluminium-Silizium-Werkstoffen. Ihre Festigkeit hängt von einer genauen Steuerung der Gussprozesse, sowie der Kontrolle des Erstarrens ab. In situ Neutronenexperimente mit den hochintensiven Neutronenstrahlen der ESS werden die Wissensbasis entscheidend erweitern. Ähnliches gilt für In situ-Charakterisierung von Schweißprozessen, wo es auf schnelle Messverfahren, die hoher Intensität bedürfen, ankommt. Neutronen dringen tief in Materialien ein und sind gleichzeitig besonders für leichte Atome empfindlich. So kann das Verhalten von Schmierstoffen in Motoren während des Betriebs beobachtet und optimiert werden. In Batterien oder Brennstoffzellen ist es möglich, während des Betriebs die Lithium-Verteilung oder das Entstehen von Wasser während der katalytischen Umsetzung in der laufenden Brennstoffzelle zu beobachten. Der Wechsel zwischen leichtem und schwerem Wasserstoff ermöglicht es zusätzlich, die Kinetik von Austauschprozessen zu untersuchen.

A1.5 Werkstoffe der chemischen Industrie

Die Werkstoffe der Chemie bestehen häufig aus einer Vielzahl von Komponenten, die sich auf der Skala zwischen Nano- und Mikrometern selbst organisieren, und dadurch das Verhalten des Gesamtsystems bestimmen. Beispiele sind funktionale Materialien, die auf äußere Stimuli, wie z. B. Spannung, Temperatur, elektrische Felder auf sehr kontrollierte Weise reagieren, oder so genannte weiche Materie mit ihrem Verhalten zwischen fest und flüssig. Dazu gehören Kolloide wie Lacke, Farben oder Mikroemulsionen von Waschmitteln, Wirkstoffformulierungen in der Pharmazie, bis hin zur tertiären Ölförderung, oder Gele in Form von Salben, Cremes und Produkten der Körperpflege und viele andere Materialien mehr. Neutronen mit ihrer Fähigkeit der Kontrastvariation sind ein unverzichtbares Werkzeug, die Strukturen einzelner Komponenten sowie ihre Bewegung zu entschlüsseln. Dies gilt für die molekularen Ursachen rheologischer Verhaltens, das bei der Polymerverarbeitung von größter Bedeutung ist, genauso wie für die Stabilität von Nahrungsmitteln, die meistens hochkomplexe Formulierungen verschiedenster Stoffe sind. Ein industrielles Beispiel ist der Einsatz von CO₂ basierten Lösungsmitteln für die Extraktion von Öl aus Lagerstätten, die eine Erhöhung der Ausbeute um bis zu 30 % ermöglichen. Ein Verständnis der zugrunde liegenden Formulierungen liefern Neutronenexperimente. Ähnliches gilt für den Ersatz von organischen Lösungsmitteln durch ionische Flüssigkeiten in der Pharmazie. Hier sind Strukturuntersuchungen mit Neutronen von größter Bedeutung. Ein anderes Feld ist die Optimierung von Katalysatoren, Beispiele sind der „Lindlar-Katalysator“ von Evonik oder Katalysatoren für die PVC-Synthese von Ineos Chlorvinyls. Bei der Komplexität der zugrunde liegenden Materialien und der Notwendigkeit, Prozesse mit hoher Zeitauflösung zu verfolgen, ist die Intensität der Neutronenstrahlung ein entscheidendes Element. Hier wird die ESS ermöglichen, die bisher einzelnen beispielhaften Anwendungen im industriellen Umfeld in die volle Breite zu entwickeln.

A1.6. Quantentechnologien

Bereits heute tragen Technologien, die auf Erkenntnissen der Quantenphysik basieren, mit mehr als einem Viertel zum Bruttosozialprodukt moderner Industriegesellschaften bei. Beispiele sind Magnetresonanztomographie oder Röntgenradiographie in der Medizin, Photovoltaikanlagen in der Energietechnik, Halbleiterbauelemente in der Informations- und Kommunikationstechnologie. Besonders faszinierend sind sogenannte makroskopische Quantenphänomene von Festkörpern, wie der Magnetismus oder die Supraleitung, bei denen sich die Quantenmechanik in makroskopisch beobachtbaren Eigenschaften widerspiegelt. Seit der Entdeckung der Supraleitung in Kupfer-Sauerstoffverbindungen und der Erkenntnis, dass die hohen Übergangstemperaturen durch elektronische Korrelationen zustande kommen, geht man davon aus, dass der Realisierung von Supraleitung bei Raumtemperatur keine grundsätzlichen Grenzen entgegenstehen. Die damit verbundene verlustfreie Energieübertragung und -Speicherung wäre ein sensationeller Durchbruch für die Energietechnik. Während der Mechanismus der Hochtemperatursupraleitung immer noch nicht eindeutig geklärt ist, haben Neutronen wesentlich zum grundsätzlichen Verständnis beigetragen, da sie das Wechselspiel zwischen Supraleitung und Magnetismus, sowie Supraleitung und Gitterschwingungen beleuchten können. Insbesondere konnten magnetische Fluktuationen im supraleitenden Zustand gefunden werden, die in einigen Theorien als entscheidend für die hohen Sprungtemperaturen angesehen werden. In den letzten Jahren wurden weitere, eisenbasierte Hochtemperatursupraleiter gefunden, bei denen mit Neutronenstreuung ein ähnliches Szenario gefunden wurde – ein weiterer wichtiger Meilenstein auf dem Weg zur gezielten Suche nach Raumtemperatursupraleitern. Erst in diesem Jahr konnte mit Neutronenstreuung ein kollektiver Grundzustand im Bereich des Magnetismus nachgewiesen werden, der in gewisser Analogie zur Supraleitung durch den Higgs-Mechanismus zustande kommt. Dieser kollektive Zustand magnetischer Monopole ermöglicht in Zukunft innovative Ansätze für eine neuartige Spintronik, wenn es gelingt, diesen Zustand bei höheren Temperaturen zu realisieren und Monopolströme geeignet zu kontrollieren. Hierzu ist ein Verständnis des Anregungsspektrums Grundvoraussetzung – eine Domäne der Neutronenstreuung!